

**RÔLE DES ONDES DE DENSITÉ DANS LES
MODÈLES THÉORIQUES POUR CUPRATES
SUPRACONDUCTEURS**

par

SIMON VERRET

Thèse présentée au département de physique
en vue de l'obtention du grade de docteur ès sciences (Ph.D.)

FACULTÉ des SCIENCES
UNIVERSITÉ de SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 9 avril 2018

Le 9 avril 2018

le jury a accepté la thèse de Monsieur Simon Verret dans sa version finale.

Membres du jury

Prof. André-Marie Tremblay
Directeur de recherche
Département de physique

Prof. David Sénéchal
Codirecteur de recherche
Département de physique

Prof. Patrick Fournier
Membre interne
Département de physique

Dr. Catherine Pépin
Membre externe
Institut de physique théorique, CEA Saclay

Prof. René Côté
Président rapporteur
Département de physique

Pourtant toute la science de cette terre ne me donnera rien qui puisse m'assurer que ce monde est à moi. Vous me le décrivez et vous m'apprenez à le classer. Vous énumérez ses lois et dans ma soif de savoir je consens qu'elles soient vraies. Vous démontez son mécanisme et mon espoir s'accroît. Au terme dernier, vous m'apprenez que cet univers prestigieux et bariolé se réduit à l'atome et lui-même se réduit à l'électron. Tout ceci est bon et j'attends que vous continuiez. Mais vous me parlez d'un invisible système planétaire où des électrons gravitent autour d'un noyau. Vous m'expliquez ce monde avec une image. Je reconnais alors que vous en êtes venus à la poésie : je ne connaîtrai jamais.

— Albert Camus

SOMMAIRE

Depuis leur découverte, les ondes de densité occupent une place de plus en plus importante dans notre compréhension de la supraconductivité à haute température critique. Leur rôle demeure toutefois incertain pour plusieurs observations expérimentales. L'objectif de cette thèse est de déterminer si les ondes de densité peuvent expliquer certaines de ces observations. Ces dernières incluent (i) le gap partiel (pseudogap) mesuré dans la densité d'états, (ii) les sous-structures du gap supraconducteur observées dans les coeurs de vortex, et (iii) l'augmentation rapide de p à $1 + p$ dans les mesures du nombre de Hall au dopage p^* . Huit modèles phénoménologiques de type champ-moyen sont présentés pour étudier ces phénomènes. Les résultats indiquent que l'approximation du champ moyen pour les ondes de densité observées dans les cuprates ne peut pas expliquer le gap partiel dans la densité d'états, mais elle fournit une bonne explication des sous-structures du gap supraconducteur. Pour reproduire l'augmentation rapide du nombre de Hall, la démarche proposée par Storey est suivie avec les modèles phénoménologiques d'antiferromagnétisme, d'antiferromagnétisme spiral et la théorie Yang-Rice-Zhang. En comparant ces trois modèles à un modèle d'onde de densité de spin incommensurable colinéaire, on identifie le point commun qui fait leur force : ils séparent la dispersion du modèle à une bande des cuprates en deux nouvelles bandes. Pour mettre ces modèles à l'épreuve, leur prédictions pour la chaleur spécifique et l'effet Seebeck sont obtenues afin de les comparer une éventuelle mesure expérimentale dans les mêmes conditions que pour le nombre de Hall.

PUBLICATIONS

- [1] S. Verret, M. Charlebois, D. Sénéchal, A.-M. S. Tremblay. *Subgap structures and pseudogap in cuprate superconductors : Role of density waves*, Physical Review B 95, 054518 (2017), 12 pages.

- [2] S. Verret, O. Simard, M. Charlebois, D. Sénéchal, A.-M. S. Tremblay. *Phenomenological theories of the low-temperature pseudogap : Hall number, specific heat, and Seebeck coefficient*, Physical Review B 96, 125139 (2017), 11 pages.

- [3] M. Charlebois, S. Verret, A. Foley, D. Sénéchal, A.-M. S. Tremblay. *Hall effect in cuprates with incommensurate collinear spin-density wave*, Physical Review B 96, 205132 (2017), 9 pages.

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier le comité rapporteur pour le temps pris à lire cette thèse : André-Marie Tremblay, David Sénéchal, Patrick Fournier, Catherine Pépin, et René Côté. Du fond du coeur, je remercie mes codirecteurs André-Marie Tremblay et David Sénéchal, pour leur support indéfectible, leurs suggestions tout au long de mon doctorat, et pour être, à tous les niveaux, des modèles à suivre. Un merci particulier à Maxime Charlebois, pour qui j'ai développé une amitié profonde, et sans l'aide de qui j'aurais certainement eu besoin d'une ou deux années supplémentaires pour finir ma thèse. Merci aux stagiaires Jyotirmoy Roy et Olivier Simard d'avoir fait le défrichage des projets centraux à cette thèse. Merci à ceux qui m'ont relu à la dernière minute : Gaël Grissonnache, Olivier Simard, Olivier Grenier, Marie-Eve Boulanger, et Adrien Gourgout. Merci aux membres du département avec qui j'ai eu des discussions stimulantes : Alexandre Foley, Patrick Fournier, Maxime Dion, Alexis Reymbaut, Charles-David Hébert, Shaheen Acheche, Reza Nourafkan, et Jan Gukelberger. Et de manière générale, merci aux gens du département de physique de l'Université de Sherbrooke d'être si humains, érudits, et authentiques. Cette thèse fut réalisée grâce au soutien financier de plusieurs entités qui ont toute ma reconnaissance : les Fonds de recherche Nature et Technologie du Québec, le Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada (sous la subvention No. RGPIN-2014-04584), les Fonds d'excellence en recherche Apogée Canada, et la Chaire de recherche en théorie des matériaux quantiques d'André-Marie Tremblay. Les simulations furent réalisées sur les ordinateurs fournis par la Fondation canadienne pour l'innovation, le ministère de l'Éducation des Loisirs et du Sport du Québec, et Calcul Canada.

Sur une note plus personnelle, merci à mes amis de Sherbrooke : Alexandre Juneau Fecteau, Karl Thibault, Ariane Vigeant, Olivier Grenier, Kim St-Jacques, Gaël Grissonnache, Maxime Dion, Olivier Simard, Gabriel Poulin-Lamarre. Merci aussi aux amis de longue date, qui restent fidèles au poste, à Québec : Simon Gourdeau, Maxime Tessier, Kathleen Bannon, Claudia Marceau-Landry, Danny Côté, et Sébastien Girard. Merci aussi à ma famille étendue de colocs de Sherbrooke : Jean-Simon Roy, Simon-Louis Pépin, Quentin Horn, Camil Hamel, Claude MacKay, Lissandre Beauchemin, Audrey-Jeanne Beaudoin, Véronique Bédard-Tremblay, Vincent Bélanger Fortin, Paul Blais-Morissette, Simon Couillard,

Gabrielle Sirois-Giguère, Gabriel Dumesnil, Jonathan Grégoire, Laurie Hamelin, Mathieu Lessard, Claudia Poirio, et Charles Rodrigue, une vraiment belle gang! De plus, merci à certains enseignants et professeurs de vie qui ont eu impact considérable sur mon parcours : Aline Gagné, Gino Nicole, François-Guillaume Leblanc, Steeve Beaupré, Jean-François Lemay et Danièle Pacaud. Plus particulièrement, merci à Julien Richard, qui m’a appris à ramer pour gagner, quoiqu’il arrive, tant que la course n’est pas terminée¹. Merci aussi à Claudine Allen de m’avoir initié à la recherche, m’avoir intéressé à la physique du solide, et m’avoir donné confiance à certains moments clés.

Enfin, je souhaite témoigner une grande reconnaissance et un amour profond aux membres de ma famille, car je prends conscience, avec le temps, de la chance prodigieuse que j’ai de les avoir eus et de les avoirs toujours : Joannie Verret, Sébastien Verret, Denis Verret, Lucie Bissonnette, France Tremblay, Louis Bissonnette, Denise Roberge, et Albert Verret. Et pour finir, un merci empreint d’amour, d’amitié et surtout, d’admiration, à Sophie Rochette, qui rend les jours légers, heureux et importants pour moi.

1. Et à ne pas avoir peur des gros gars de Mic Mac.

TABLE DES MATIÈRES

SOMMAIRE	iv
PUBLICATIONS	v
TABLE DES MATIÈRES	viii
LISTE DES FIGURES	xi
LISTE DES TABLEAUX	xiii
NOTATIONS	xiv
INTRODUCTION	1
I CUPRATES	4
1 Introduction aux cuprates	4
1.1 Supraconductivité non conventionnelle	4
1.2 Supraconducteurs à haute température critique	5
1.3 Structure et interactions fortes	7
2 Cuprates dopés aux trous	8
2.1 Diagramme de phases	8
2.2 Supraconductivité de type d	10
2.3 Pseudogap	12
3 Ondes de densité dans les cuprates	14
3.1 Ondes de densité de charge	14
3.2 Ondes de densité de paires	18
4 Cuprates en champ magnétique	19
4.1 Sous-structures du gap supraconducteur	19
4.2 Nombre de Hall	21
5 Questions étudiées dans cette thèse	23
II NOTIONS FONDAMENTALES	24
6 Théorie des bandes de Bloch	24
6.1 Électrons dans un potentiel périodique cristallin	24

6.2	Approximation des liaisons fortes en seconde quantification	26
6.3	Paramètres de bande pour les cuprates	27
7	Corrélations fortes	29
7.1	Modèle de Hubbard	29
7.2	Symétries brisées	30
7.3	Justification de l'approche phénoménologique	31
8	Antiferromagnétisme, supraconductivité et pseudogap	32
8.1	Antiferromagnétisme	32
8.2	Supraconductivité	34
8.3	Théories du pseudogap	36
9	Gaps de type AF ou de type SC	37
III	ONDES DE DENSITÉ	40
10	Champs moyens d'ondes de densité	40
10.1	Hamiltonien général	40
10.2	Onde de densité à $Q = \frac{2\pi}{3}$ en une dimension	41
10.3	d FF-DW	42
10.4	s' PDW	43
10.5	Représentation matricielle du hamiltonien général	44
10.6	Densité d'états et poids spectral	46
11	Ondes de densité et pseudogap	47
11.1	Onde de densité en une dimension	47
11.2	Gaps du champ moyen antiferromagnétique	49
11.3	Gaps du champ moyen d FF-DW	51
11.4	Rôle des ondes de densité pour le pseudogap	54
12	Ondes de densité et sous-structures du gap de type d	55
12.1	Champ moyen antiferromagnétique	55
12.2	Champ moyen d FF-DW et s' PDW	58
12.3	Pseudogap de type AF avec ondes de densité	61
13	Récapitulatif	63
IV	TRANSPORT DANS LE PSEUDOGAP	64
14	Théories phénoménologiques du pseudogap	64
14.1	Modèle AF	64
14.2	Modèle s AF	65
14.3	Onde de densité de spin incommensurable colinéaire	66
14.4	Théorie Yang-Rice-Zhang (YRZ)	66

15	Formalisme unifié des modèles AF, sAF et YRZ	68
15.1	Hamiltonien et valeurs propres	68
15.2	Vitesse de Fermi	69
15.3	Poids spectral	70
15.4	Taux de diffusion	71
15.5	Dopage	72
16	Calcul de la chaleur spécifique et des coefficients de transport	72
16.1	Effet Hall	72
16.2	Chaleur spécifique	74
16.3	Coefficient Seebeck	74
17	Ondes de densité et nombre de Hall	75
17.1	Succès des modèles AF, sAF et YRZ	75
17.2	Onde de densité de spin incommensurable colinéaire	76
17.3	Importance du nombre de bandes	76
18	Prédictions pour la chaleur spécifique et l'effet Seebeck	78
18.1	Singularité de van Hove et taux de diffusion	78
18.2	Séparation de p^* et p_e dans le modèle AF	80
18.3	Comparaison des modèles AF, sAF et YRZ	82
19	Récapitulatif	83
CONCLUSION		85
ANNEXES		88
A.1	Représentation de Bloch	88
A.1.1	Normalisation	88
A.1.2	Base des fonctions de Bloch	89
A.2	Réseau et super-réseau	92
A.2.1	Idée générale	92
A.2.2	Définitions	92
A.2.3	Décomposition des vecteurs	95
A.2.4	Représentation mixte $(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}})$ en seconde quantification	97
A.3	Utilisation du hamiltonien général pour ondes de densité	101
A.3.1	Autres conventions	101
A.3.2	Exemple 1D de la forme matricielle	103
A.3.3	Représentation $(\mathbf{K}, \mathbf{K}')$ générale	106
A.3.4	Représentation $(\mathbf{R}, \mathbf{R}')$ générale	108
A.4	Dérivées des énergies propres	110
BIBLIOGRAPHIE		112

LISTE DES FIGURES

CUPRATES 4

- 1 La supraconductivité au cours du temps 6
- 2 Structure en couches atomiques des cuprates 8
- 3 Diagrammes de phases expérimentaux de LSCO et YBCO 9
- 4 Gaps supraconducteurs mesurés par effet tunnel 10
- 5 Facteur de forme de type d 11
- 6 Dichotomie nodale-antinodale en ARPES dans BSCCO 13
- 7 Inhomogénéité du pseudogap en STM dans BSCCO 15
- 8 Facteurs de forme et domaines de cohérence de l'onde de densité 16
- 9 Vecteurs d'onde mesurés par rayons X et STM 18
- 10 Sous-structures du gap dans les vortex en STM dans BSCCO 20
- 11 Augmentation rapide du nombre de Hall dans YBCO et Nd-LSCO 22

NOTIONS FONDAMENTALES 24

- 12 Surfaces de Fermi pour différents paramètres de bande 29

GAPS DES ONDES DE DENSITÉ 40

- 13 Facteurs de forme des ordres d_{FF} -DW et s' PDW 43
- 14 Gaps d'une onde de densité en une dimension 48
- 15 Gaps en champ moyen antiferromagnétique 50
- 16 Positions des gaps en deux dimensions pour l'ordre d_{FF} -DW 52
- 17 Densité d'états en champ moyen d_{FF} -DW bidirectionnel 53
- 18 Densité d'états en champ moyen d_{FF} -DW unidirectionnel 54
- 19 Sous-structures du gap supraconducteur de type d en présence d'antiferromagnétisme 56
- 20 Origine des sous-structures de gap 57
- 21 Déformations du gap de type d en champ moyen d_{FF} -DW et s' PDW 59
- 22 Surfaces de Fermi en champ moyen d_{FF} -DW et s' PDW 60

- 23 Densité d'états pour des combinaisons de champs moyens SC, AF, d FF-DW
et s' PDW 61

TRANSPORT DANS LE PSEUDOGAP 64

- 24 Rapport entre gap et largeur de bande dans les modèles AF, sAF et YRZ 69
 25 Poids spectral dans les approximations τ -constant et ℓ -isotrope. 71
 26 Résultats de Storey et Eberlein pour le nombre de Hall 75
 27 Nombre de Hall pour l'onde de densité de spin incommensurable colinéaire 77
 28 Effets de la singularité de van Hove sur n_H , C_V et S_x 78
 29 Influence des paramètres de bande sur le transport dans le modèle AF 81
 30 Explication de la relation entre p_e , p^* et p_{vHS} 82
 31 Comparaison des résultats de transport dans les modèles AF sAF et YRZ 84

ANNEXES 88

- A.1 Réseau, super-réseau, réseau réciproque et super-réseau réciproque 93
 A.2 Exemples de deux conventions pour le modulo à diviseur positif 95

LISTE DES TABLEAUX

- 1 Paramètres de bande utilisés dans cette thèse 27
- 2 Différences entre les modèles AF, sAF et YRZ dans le formalisme unifié 73

NOTATIONS

Acronymes

AF	Antiferromagnétisme ou antiferromagnétique
ARPES	Photoémission résolue en angle (<i>angle-resolved photoemission spectroscopy</i>)
BCS	Bardeen, Cooper, Schrieffer (auteurs de la théorie BCS)
BSCCO	Cuprate bicouche de la famille bismuth : $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$.
CDW	Onde de densité de charge (<i>charge density wave</i>)
c.h.	Conjugué hermitien
d FF-DW	Onde de densité de charge à facteur de forme d (<i>d-form-factor density wave</i>)
DMFT	Théorie de champs moyen dynamique (<i>dynamical mean field theory</i>)
DFT	Théorie de la fonctionnelle de densité (<i>density functional theory</i>)
LSCO	Cuprate monocouche de la famille lanthane : $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_2\text{O}$
PDW	Onde de densité de paires de Cooper (<i>pair density wave</i>)
PG	Pseudogap
PPCM	Plus petit commun multiple
rBZ	Zone de Brillouin réduite (<i>reduced Brillouin zone</i>)
sAF	Antiferromagnétisme incommensurable spiral
SC	Supraconductivité ou supraconducteur
SDW	Onde de densité de spin (<i>spin density wave</i>)
SGS	Sous-structures de gap (<i>subgap structures</i>)
SJTM	Microscopie à balayage à effet tunnel Josephson (<i>scanning Josephson tunnelling microscopy</i>)
s' PDW	Onde de densité de paires à facteur de forme s'
STM	Microscopie à balayage à effet tunnel (STM, <i>scanning tunnelling microscopy</i>)
vHS	Singularité de van Hove (<i>van Hove singularity</i>)

YBCO	Cuprate bicouche $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$
YRZ	Yang, Rice et Zhang (auteurs de la théorie YRZ)

Symboles mathématiques

*	Dénote le conjugué complexe
\dagger	Dénote le conjugué hermitien
$ 0\rangle$	Vide d'électrons
$\nabla_{\mathbf{k}}$	Gradient dans l'espace des vecteurs d'ondes
$\alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \alpha_{\mathbf{k},\downarrow}$	Opérateurs création et annihilation de bogolioubons
$ \alpha_{\mathbf{k}}\rangle$	État quelconque
β	Température inverse $\beta = 1/k_B T$
Γ	Super-réseau $\Gamma = \{\tilde{\mathbf{r}}\}$
$\Gamma_{n\mathbf{k}}$	Taux de diffusion
γ	Réseau $\gamma = \{\mathbf{r}\}$
Δ	Amplitude du gap supraconducteur (de type d)
$\Delta(\mathbf{k}), \Delta_{\mathbf{k}}$	Gap supraconducteur de type d : $\Delta(\mathbf{k}) = \frac{\Delta}{2}(\cos k_x - \cos k_y)$
$\Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}}(p)$	Pseudogap phénoménologique de la théorie YRZ
Δ_Q	Amplitude du champ moyen d'onde de densité de paires
$\Delta_{Q,\mathbf{a}}$	Composante du champ moyen d'onde de densité de paires sur le lien \mathbf{a} et de vecteur d'onde \mathbf{Q}
Δ_s	Gap supraconducteur de type s
$\delta_a, \delta_{a,b}$	Fonctions delta de Kronecker, $\delta_a = 1$ si $a = 0$ et $\delta_{a,b} = 1$ si $a = b$, autrement 0
ϵ	Énergie $\epsilon = \hbar\omega$ ou énergie propre recherchée
$\epsilon_n(\mathbf{k})$	n -ième bande de Bloch
η	Facteur assurant la causalité de la fonction de Green, limite $\eta \rightarrow 0$ implicite
θ	Angle azimutal défini du point $\mathbf{k} = (0, 0)$
$\theta_{Q,\mathbf{a}}$	Phase de l'onde de densité de paires sur le lien \mathbf{a} et de vecteur d'onde \mathbf{Q}
μ	Potentiel chimique
$\xi_{\mathbf{k}}$	Bande relative au potentiel chimique $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_n(\mathbf{k}) - \mu$, à n fixé

$\xi_{\mathbf{k}}^0$	Dispersion auxiliaire (théorie YRZ)
$\xi_{\mathbf{k}}^d$	Dispersion auxiliaire des théories phénoménologiques
$\xi_{\mathbf{k}}^g$	Dispersion renormalisée (théorie YRZ)
ϕ	Angle azimutal défini à partir du point $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$
$\phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}$	Phase de l'onde de densité sur le lien \mathbf{a} de vecteur d'onde \mathbf{Q}
$\Psi_{\mathbf{k}}$	Spineur de Nambu ou spineur des théories phénoménologiques
$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$	Fonction de Bloch
$ \psi\rangle$	État propre de l'équation de Schrödinger associé à l'énergie ϵ
$ \psi_n\rangle$	Vecteur propre du hamiltonien matriciel $\hat{H}_{\mathbf{k}}$
$ \psi_{n\mathbf{k}}\rangle, \psi_{n\mathbf{k},\sigma}\rangle$	État de Bloch
ρ_{xy}, ρ_{yx}	Résistivité transverse
σ	Spin prenant les valeurs \uparrow ou \downarrow , équivalentes à +1 et -1 respectivement.
σ_{xx}, σ_{yy}	Conductivité longitudinale
σ_{xy}, σ_{yx}	Conductivité transverse
τ	Temps de vie
Ω	Vide de Nambu
ω	Fréquence, relié à l'énergie par $\epsilon = \hbar\omega$
$A_{\mathbf{k}}(\omega)$	Poids spectral total à l'énergie ω
$A_{\alpha,\mathbf{k}}(\omega)$	Poids spectral de l'état α
$A_{n\mathbf{k},\sigma}(\omega)$	Poids spectral de spin σ dans la bande n
$\hat{A}_{\mathbf{k}}(\omega)$	Forme matricielle du poids spectral
$\hat{A}_{n\mathbf{k}}(\omega)$	Forme matricielle du poids spectral dans la bande n
a	Paramètre de maille du réseau carré ($a = 1$ lorsqu'omis)
\mathbf{a}	Position d'un site voisin (relativement au site \mathbf{r} considéré)
\mathbf{a}_i	Vecteur de base du réseau
$\tilde{\mathbf{a}}_i$	Vecteur de base du super-réseau
$a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, a_{\mathbf{k},\sigma}$	Opérateurs création et annihilation des quasi-particules propres
B	Amplitude du champ magnétique appliqué dans la direction z
\mathbf{b}_i	Vecteur de base du réseau réciproque
$\tilde{\mathbf{b}}_i$	Vecteur de base du super-réseau réciproque

C_V	Chaleur spécifique
$c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k},\sigma}$	Opérateurs création et annihilation d'un électron dans l'état de Bloch $ \psi_{n\mathbf{k},\sigma}\rangle$
$c_{\mathbf{r},\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{r},\sigma}$	Opérateurs création et annihilation d'un électron dans l'état de Wannier $ w_{n\mathbf{r},\sigma}\rangle$
$c_{\mathbf{R}}^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}), c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}})$	Opérateurs création et annihilation de la représentation mixte
$d_{\mathbf{k}}^\dagger, d_{\mathbf{k}}$	Opérateurs création et annihilation d'une particule auxiliaire
$E_{n\mathbf{k}}$ ou $E_{\mathbf{k}}^\pm$	Énergie propre; bande n
e	Constante d'Euler
e	Charge de l'électron
$f(\epsilon)$	Distribution de Fermi-Dirac
\mathbf{G}	Vecteur du réseau réciproque original ($\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} \equiv 2\pi$)
$g_t(p), g_s(p)$	Facteurs de Gutzwiller
H_0	Hamiltonien donnant $\xi_{\mathbf{k}}$
$H^{\text{modèle}}$	Hamiltonien pour un modèle donné
$\hat{H}_{\mathbf{k}}^{\text{modèle}}$	Hamiltonien sous forme matricielle pour un modèle donné
\hbar	Constante de Planck réduite
i	Unité imaginaire
i, j	Indices matriciels
\mathbf{K}	Vecteur du super-réseau réciproque ($\mathbf{K} \cdot \tilde{\mathbf{r}} \equiv 2\pi$) borné à la zone de Brillouin.
$\tilde{\mathbf{k}}$	Vecteur d'onde borné à la zone de Brillouin réduite.
\mathbf{k}	Vecteur d'onde borné à la zone de Brillouin; $\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$
$ \mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle$	Base hybride périodique en \mathbf{k}
k_B	Constante de Boltzmann
$\mathbf{k}_{\text{cr.}}$	Vecteur d'onde où se produit un croisement de bandes
k_x, k_y	Composantes en x et y du vecteur d'onde \mathbf{k}
L, L_x, L_y	Taille de la maille élémentaire du surper-réseau en x et en y
L	Nombre de site dans l'amas $L = \hat{L} $ (annexe seulement)
\hat{L}	Matrice définissant le super-réseau à partir du réseau
ℓ	Libre parcours moyen
M	Amplitude du champ moyen antiferromagnétique
$M_{\mathbf{k}}(p)$	Amplitude du champ moyen phénoménologique

m	Masse de l'électron ou facteur entier
N	Nombre de mailles élémentaires dans le cristal
$N(\epsilon)$	Densité d'états (fonction de l'énergie $\epsilon = \hbar\omega$)
n	Nombre d'électrons par maille ou indice de bande ou facteur entier
n_H	Nombre de Hall
P	Opérateur quantité de mouvement
p	Dopage en trou
p^*	Dopage auquel le pseudogap disparaît
p_e	Dopage auquel les pochettes d'électrons apparaissent au niveau de Fermi
p_{VHS}	Dopage de la singularité de van Hove
\mathbf{Q}	Vecteur d'onde de l'onde de densité
Q	Norme du vecteur d'onde de l'onde de densité
\mathbf{q}	Vecteur d'onde non-borné $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$
\mathbf{R}	Position d'un site dans la maille élémentaire du super-réseau (site d'amas).
R_H	Coefficient de Hall
$\tilde{\mathbf{r}}$	Vecteur appartenant au super-réseau (Position d'un amas).
\mathbf{r}	Vecteur appartenant au réseau (Position d'un site du réseau) $\mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}$.
S	Entropie
S_x, S_y	Coefficients Seebeck en x et y
\mathbf{s}	Position dans l'espace; vecteur du continuum non-borné; $\mathbf{s} = \mathbf{r} + \mathbf{x}$.
T	Température
T_c	Température critique de la supraconductivité
T^*	Température où le pseudogap disparaît
t_a	Amplitude de saut au voisin \mathbf{a}
$t, t', t'', \text{ etc.}$	Amplitude de saut au premier, second, troisième voisins, etc.
$t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}$	Composante du champ moyen d'onde de densité de vecteur \mathbf{Q} sur le lien \mathbf{a}
t_Q	Amplitude du champ moyen d'onde de densité
U	Coefficient d'interaction du modèle de Hubbard
$\hat{U}_{\mathbf{k}}$	Transformation unitaire diagonalisant l'hamiltonien
$u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$	Facteurs de cohérence supraconducteurs; éléments de la matrice $U_{\mathbf{k}}$ de la transformation de Bogolioubov

$u_{n\mathbf{r},\sigma}(\mathbf{x})$	Partie périodique de la fonction de Bloch
V	Volume complet du cristal ou opérateur de potentiel
$V_{\mathbf{G}}$	Composante de Fourier du potentiel cristallin
v	Volume de la maille élémentaire du cristal
$\mathbf{v}_{n\mathbf{r}}, \mathbf{v}_{n\mathbf{r},\sigma}$	Vitesse de groupe des particules propres
$v_{x,n\mathbf{k}\sigma}, v_{y,n\mathbf{k}\sigma}$	Composantes de la vitesse de groupe
$w_{n\mathbf{r},\sigma}(\mathbf{x})$	Fonction de Wannier
$ w_{n\mathbf{r},\sigma}\rangle$	État de Wannier
\mathbf{x}	Position dans la maille élémentaire; vecteur du continuum borné à la maille
$ \mathbf{x}, \mathbf{k}\rangle$	Base hybride périodique en \mathbf{x}
x, y	Coordonnées cartésiennes en 2D
$\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$	Vecteurs unitaires cartésiens

INTRODUCTION

«Why haven't we theoretical physicists solved this problem yet? We have no excuse that there are not enough experiments [...] We should not even have to look at the experiments. Every time we look at another experiment, we make the problem easier. It is like looking in the back of the book for the answer. [...] The only reason that we cannot do this problem of superconductivity is that we haven't got enough imagination.»

—Feynman, 1957 [4], année de découverte de la théorie BCS

Plus de 30 ans après sa découverte, la supraconductivité à haute température critique dans les cuprates n'a toujours pas d'explication. Ce n'est pas la première impasse de l'histoire des sciences, mais elle sera définitivement parmi les grandes. Où est le problème? La méthode scientifique a trois étapes : on énonce d'abord une hypothèse, on calcule ensuite ses conséquences, et enfin, on compare ces dernières aux expériences. Si les conséquences prédites sont en désaccord avec l'expérience, l'hypothèse est falsifiée et on peut passer à la suivante. Le domaine des cuprates ne manque ni d'hypothèses ni d'expériences. Le manque d'imagination est plutôt pour les méthodes de calcul. Pour qu'une hypothèse scientifique soit bonne, elle doit offrir des prédictions claires en bonne quantité; une hypothèse vague ou limitée n'est pas intéressante. Toutefois, on parle rarement des hypothèses suffisamment claires, avec un grand potentiel de prédictions, mais pour lesquelles les calculs sont impossibles. L'hypothèse favorite pour les cuprates, et ce depuis l'année même de leur découverte, est le modèle de Hubbard. On prétend, probablement avec raison, qu'il contient tous les ingrédients nécessaires pour expliquer les cuprates. Ce fut d'ailleurs relativement bien démontré pour les phénomènes de haute énergie. Toutefois, à l'échelle des basses énergies, celle-là même pour laquelle les expériences deviennent de plus en plus précises, on ne s'entend pas toujours sur les prédictions du modèle, les calculs étant trop difficiles. Ce problème persistant soulève des questions. Sera-t-on en mesure, si c'est le cas, de démontrer qu'il manque un ingrédient au modèle de Hubbard? Aura-t-on suffisamment confiance en nos prédictions pour constater l'échec du modèle ou restera-t-on dans l'incertitude à cause de l'imprécision de nos calculs? S'il y a bon espoir que les méthodes adéquates arriveront, il faut aussi être préparé à l'éventualité qu'elles n'arrivent pas. Et dans cette éventualité, il

faudra que la solution menant à un consensus pour les cuprates vienne d'ailleurs; notre manque d'imagination en redevient donc un pour les hypothèses.

Cette thèse délaisse le modèle de Hubbard pour étudier plusieurs modèles phénoménologiques liés aux cuprates, afin de clarifier leurs forces et leurs faiblesses. Étant surtout inspirés des observations expérimentales, la plupart de ces modèles incluent des ondes de densité. On s'intéresse ainsi aux champs moyens pour la supraconductivité, l'antiferromagnétisme, l'onde de densité de charge à facteur de forme d (ordre d FF-DW), l'onde de densité de paires à facteur de forme s étendue (ordre s' PDW) ainsi que les ondes de densité de spin incommensurables spirales et colinéaires. Ces champs moyens sont utilisés seuls ou en combinaison les uns avec les autres, selon le cas. L'objectif est de se familiariser avec ces modèles et de déterminer ce qui leur permet ou non de reproduire certaines observations expérimentales. Les observations sélectionnées, revues en détail, sont la présence d'un gap partiel (le pseudogap) dans la densité d'états, la présence de sous-structures dans le gap supraconducteur, et le changement brusque du nombre de Hall à l'approche du dopage p^* où le pseudogap disparaît. Pour le changement du nombre de Hall, en particulier, nous suivons de près la démarche développée par Storey pour le modèle antiferromagnétique et la théorie Yang-Rice-Zhang, et suivie aussi par Eberlein pour l'onde de densité de spin incommensurable spirale. Avec ces trois modèles, nous obtenons des prédictions pour la chaleur spécifique et le coefficient Seebeck dans les mêmes conditions que le nombre de Hall.

Dans la mesure du possible, la thèse est divisée de manière à grouper les modèles avec leurs résultats respectifs. Le chapitre I dresse un portrait de la supraconductivité à haute température critique dans les cuprates. On présente certains résultats expérimentaux importants, en insistant sur ceux visés par la thèse : le pseudogap, les ondes de densité, les sous-structures du gap supraconducteur, et les résultats pour le nombre de Hall. À la fin du chapitre, les questions qui guident le reste de la thèse sont énoncées. Le chapitre II établit ensuite les bases fondamentales des modèles utilisés. La théorie des bandes et le modèle de Hubbard sont discutés en détail avant de justifier l'approche phénoménologique utilisée dans le reste de la thèse. Les champs moyens antiferromagnétique et supraconducteur de type d sont ensuite présentés et le chapitre se termine en groupant les théories du pseudogap en deux catégories pour faciliter l'analyse des résultats. Le chapitre III étudie les gaps dans la densité d'états en présence d'ondes de densité. On y définit les champs moyens de l'ordre d FF-DW et de l'ordre s' PDW qui sont ensuite étudiés seuls et en coexistence avec la supraconductivité de type d et l'antiferromagnétisme. On trouve qu'il est impossible d'obtenir un gap au niveau de Fermi avec les ondes de densité seulement, mais, en leur présence, le gap supraconducteur de type d est déformé et fournit un accord plutôt satisfaisant avec les sous-structures du

gap expérimental. Le chapitre **IV**, pour sa part, s'intéresse au changement brusque du nombre de Hall à p^* . On y présente les théories l'ayant reproduite avec succès : les modèles phénoménologiques d'antiferromagnétisme, d'onde de densité de spin incommensurable spirale, et la théorie Yang-Rice-Zhang. On compare ces derniers avec un modèle d'onde de densité de spin incommensurable colinéaire qui ne reproduit pas le résultat attendu. Cela permet d'identifier une force des trois autres modèles : ils séparent la bande en deux, pas plus. On produit alors leurs prédictions pour la chaleur spécifique et l'effet Seebeck, révélant une séparation entre le dopage p^* où se ferme le pseudogap dans ces théories et le dopage p_e associé aux signatures trouvées : une augmentation rapide de la chaleur spécifique et une diminution du coefficient Seebeck.

CHAPITRE I

CUPRATES

1 Introduction aux cuprates

1.1 Supraconductivité non conventionnelle

La supraconductivité est découverte le 8 avril 1911, dans la ville de Leyde, par le chercheur Kamerlingh Onnes. Ce dernier, parvenu à liquéfier l'hélium trois ans auparavant, est seul à avoir les équipements nécessaires pour accéder aux températures extrêmement basses. Dans un échantillon de mercure refroidi à 4.2 K (-268.95°C), la résistivité électrique disparaît [5].

D'ordinaire, un courant électrique traversant un métal dissipe de l'énergie sous forme de chaleur. Or, comme l'eau qui devient glace sous 0°C , les propriétés électriques de certains métaux changent brusquement à basse température. Sous une température critique (T_c) propre à chacun, plusieurs deviennent supraconducteurs.

Deux propriétés caractérisent l'état supraconducteur. La première est l'absence de toute résistivité électrique. Un courant circule dans un supraconducteur sans aucune perte d'énergie. La deuxième, nommée effet Meissner, consiste en l'expulsion des champs magnétiques. Une démonstration spectaculaire de cette dernière est celle de la lévitation magnétique d'un supraconducteur. Ces propriétés ne se manifestent qu'à très basse température.

La supraconductivité demeure inexpliquée jusqu'en janvier 1957, lorsque John Bardeen, Leon Neil Cooper et Robert Schrieffer élaborent la théorie BCS [6, 7], maintenant nommée en leur honneur. Ils reçoivent le Prix Nobel de physique de 1972. La clé de l'énigme est l'interaction entre les électrons et les vibrations du cristal, les phonons. Cette dernière génère une forme effective d'attraction entre les électrons, menant à la formation de paires d'électrons, nommées paires de Cooper, qui condensent en un état quantique cohérent. La supraconductivité s'avère donc une des rares manifestations de la mécanique quantique à l'échelle macroscopique.

Par la suite, on découvre cependant quelques supraconducteurs dont les propriétés ne s'expliquent pas avec la théorie BCS¹. Ce sont les supraconducteurs non conventionnels. Les premiers sont les supraconducteurs organiques, découverts en 1979, lorsque Denis Jérôme et Klaus Bechgaard synthétisent un composé maintenant connu comme sel de Bechgaard. Ce dernier est supraconducteur sous une pression de 12 kBar avec une T_c de 0.9 K [8, 9]. La plus haute T_c confirmée pour un supraconducteur organique est maintenant de 38 K pour le Cs_3C_{60} , un solide à base de fullerènes (C_{60} , *buckyballs*) [10]. Vient ensuite la famille des fermions lourds, qui présentent déjà plusieurs propriétés inexplicables longtemps avant que Frank Steglich y découvre la supraconductivité, en 1979, dans le CeCuSi_2 à 0.5 K [11, 12]. La plus haute T_c confirmée pour un fermion lourd est de 18.5 K pour le PuCoGa_5 [13]. Beaucoup plus tard, en 2008, le groupe de Hideo Hosono découvre le LaFeAsO , premier supraconducteur à base de Fer, avec une T_c de 38 K [14]. La plus haute T_c pour un supraconducteur à base de fer est celle du FeSe qui attire particulièrement l'attention par sa structure cristalline simple et parce que sa T_c de 8 K pour un échantillon monocristallin [15] grimpe à 109 K en couche mince sur SrTiO_3 [16]. Et enfin, il y a la famille des cuprates, sur laquelle se concentre ce chapitre.

1.2 Supraconducteurs à haute température critique

La famille de supraconducteurs non conventionnels la plus étudiée est de loin celle des cuprates [17, 18]. En 1986, Johannes Georg Bednorz et Karl Alexander Müller découvrent le composé $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$, avec une T_c de 35 K [19], leur valant immédiatement le prix Nobel de physique de 1987. La même année, l'équipe de Paul Chu découvre la T_c de 93 K du $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (YBCO) [20], la première à dépasser la température de liquéfaction de l'azote, 77 K. On parle alors de supraconductivité à haute température : plus besoin d'hélium liquide pour accéder à l'état supraconducteur. Les cuprates rassemblent aujourd'hui une cinquantaine de composés dont les températures critiques maximales varient entre 22 K (-251°C) et 133 K (-140°C) [21], la plus élevée étant celle de $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+x}$ [22] qui détient encore le record à pression ambiante et qui monte à 164 K sous une pression de 30 GPa [23]. La figure 1 illustre l'ampleur de la révolution que représentent les cuprates par rapport aux supraconducteurs connus lors de leur découverte en 1986.

Les cuprates ne sont aujourd'hui plus les seuls supraconducteurs à haute température critique. Certains supraconducteurs à base de fer sont dignes de l'appellation, notamment

1. Dans les supraconducteurs non-conventionnels, bien que la supraconductivité soit décrite par la condensation de paires de Cooper dans un état cohérent, ces paires ne se forment pas grâce aux interactions électron-phonon. De plus, la symétrie du gap supraconducteur (voir les sections 5 et 8.2) y est souvent différente de la symétrie s de la théorie BCS

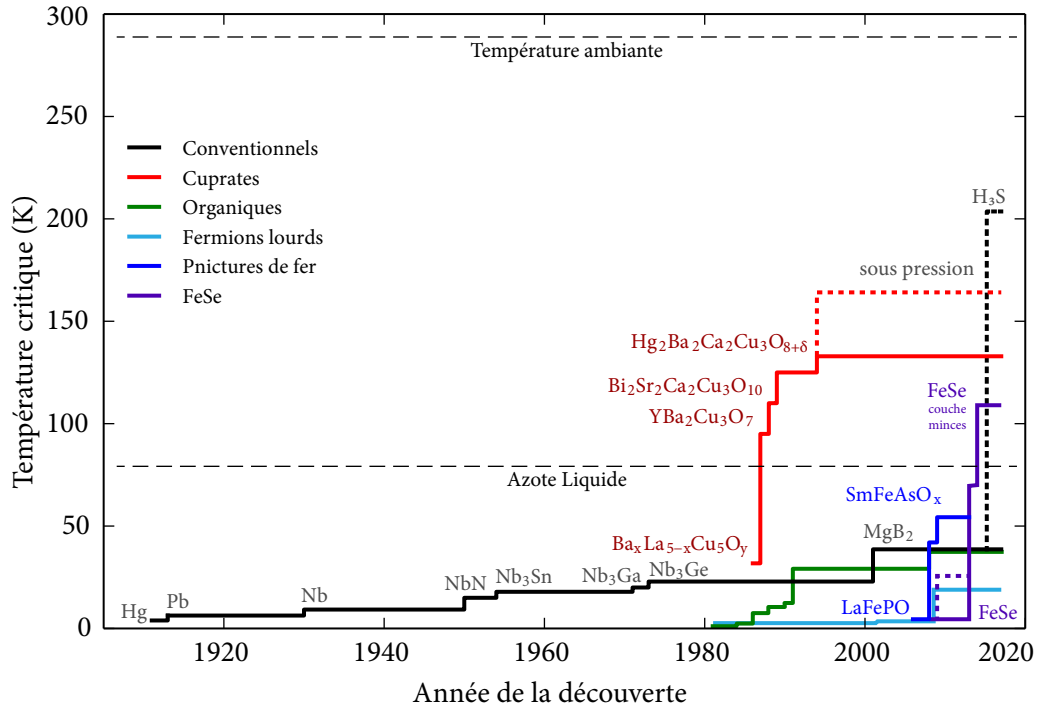


Figure 1. La supraconductivité au cours du temps Avant la découverte du FeSe en couche sur SrTiO_3 en 2014, et celle du H_3S sous pression en 2015, les cuprates sont les seuls supraconducteurs dont la T_c est supérieure à la température de liquéfaction de l'azote [18, 24].

le FeSe en couche sur SrTiO_3 mentionné plus haut. En 2015, le H_3S fait aussi une entrée retentissante avec sa T_c de 203 K [25, 26]. Le matériau nécessite une pression de 90 GPa pour demeurer dans l'état solide, mais obtient tout de même le record de la plus haute T_c jamais mesurée. Plus étonnant encore, la supraconductivité du H_3S s'explique avec la théorie BCS, il s'agit donc d'un supraconducteur conventionnel. Ashcroft avait d'ailleurs anticipé la découverte en 1968 [27], annonçant que l'hydrogène solide, obtenu sous forte pression, serait supraconducteur à haute température.

Enfin, malgré que leurs T_c soient les plus hautes connues à pression ambiante, les cuprates trouvent relativement peu d'applications commerciales [28, 29]. Ils sont utilisés dans quelques câbles et limiteurs de courant du système de distribution électrique américain [30], pour des filtres micro-ondes du réseau de télécommunications [31], pour des magnétomètres ultrasensibles à effet Josephson (SQUID, *superconducting quantum interference device*) [32], pour certains moteurs de navires, et pour des aimants à hauts champs pour la recherche scientifique [33]. Les limitations des cuprates pour les applications viennent de deux problèmes principaux : (i) ils sont plus sensibles aux fluctuations thermiques que les supraconducteurs conventionnels, ce qui cause de la dissipation de courants de vortex à haute température,

et (ii) leur propension au désordre et leur gap de type d (voir section 5) fait que les joints de grains présents dans les poudres et les échantillons polycristallins nuisent fortement à la robustesse de leur état supraconducteur. Cela rend le contrôle de qualité difficile et la fabrication industrielle des cuprates coûteuse, d'autant plus que ce sont des céramiques fragiles peu malléables. Pour ces raisons, il demeure souvent plus économique de refroidir un supraconducteur conventionnel à l'hélium liquide, par exemple le NbTi ($T_c = 9$ K) et le Nb₃Sn ($T_c = 18$ K), qui sont préférés notamment pour les aimants d'imagerie par résonance magnétique, dans les accélérateurs de particules, et dans les prototypes de réacteurs à fusion nucléaire [28].

Trois raisons motivent la recherche des mécanismes à l'origine de la supraconductivité dans les cuprates. Premièrement, une théorie microscopique des cuprates améliorerait sans doute notre compréhension d'autres matériaux exotiques, parmi lesquels se retrouvent d'autres supraconducteurs non conventionnels. Deuxièmement, à l'instar de la théorie BCS, elle permettrait possiblement de prédire quels nouveaux matériaux seraient supraconducteurs à encore plus haute température. Et troisièmement, une théorie microscopique des cuprates aiderait à mieux comprendre les limitations qui empêchent l'utilisation technologique des cuprates, permettant peut-être de libérer le potentiel de ces matériaux hors du commun.

1.3 Structure et interactions fortes

Les cuprates ont en commun une structure cristalline en plans atomiques illustrée à la figure 2. Cette structure s'accompagne d'une conductivité perpendiculaire aux plans très réduite, indiquant le caractère fortement bidimensionnel de ces matériaux. La seule couche commune à tous les cuprates est le plan de cuivre oxygène (CuO₂). Depuis leur découverte, on s'attend donc à ce qu'un modèle simple défini sur un réseau carré en deux dimensions pour simuler le plan CuO₂ puisse expliquer la plupart de leurs propriétés.

La théorie la mieux établie pour décrire la conductivité électrique des solides, la théorie des bandes, échoue de manière spectaculaire pour décrire les cuprates. Cette dernière classe les matériaux dans une de deux catégories : isolants ou conducteurs, selon la structure et le remplissage des niveaux d'énergie accessibles aux électrons dans le cristal. Le profil chimique des cuprates fait qu'au remplissage naturel des plans CuO₂—à demi-rempli : un électron par maille élémentaire dans la dernière bande occupée—ils devraient être de bons conducteurs. Ils sont toutefois isolants [17, 18].

Le caractère isolant des cuprates s'explique par la physique de Mott [35]. Dans un iso-

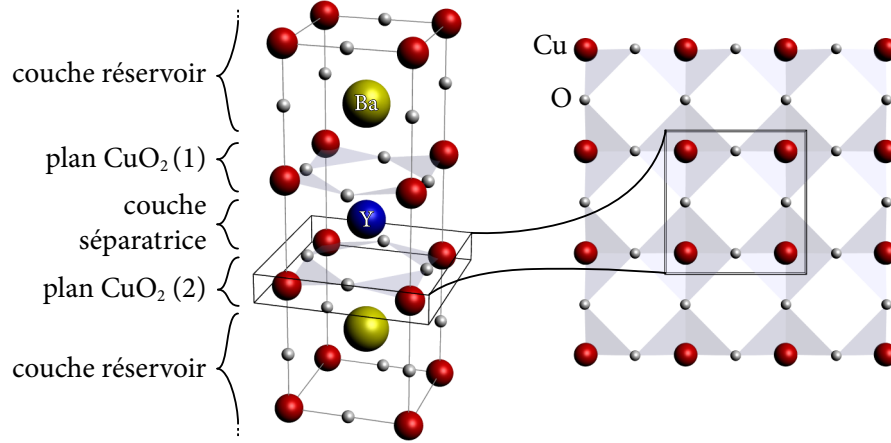


Figure 2. Structure en couches atomiques des cuprates pour $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (YBCO). Il s'agit d'un cuprate bicouche, c'est-à-dire que chaque maille élémentaire du cristal contient deux plans de cuivre oxygènes (CuO_2). Ces derniers sont séparés par une couche d'Yttrium et les paires de plans sont séparées par des couches réservoirs, où se retrouvent les dopants (voir section 2). Certains autres cuprates [21] peuvent être synthétisés avec un nombre arbitraire de plans CuO_2 dans la maille élémentaire; dans ce cas la T_c maximale pour une même composition se produit toujours pour trois plans par maille élémentaire [34].

lant de Mott à demi-rempli, la forte répulsion de Coulomb entre les électrons empêche ces derniers de se déplacer librement, entravant la conductivité électrique. Dans les cuprates, la répulsion de Coulomb est effectivement forte en comparaison à l'énergie cinétique des électrons. Cela s'explique, d'une part, par la taille relativement grande de la maille élémentaire du cristal (paramètre de maille d'environ 0.3 nm) qui limite l'énergie cinétique et, d'autre part, par le caractère compact de l'orbitale $3d$ de l'atome de cuivre qui réduit la distance moyenne entre électrons et augmente ainsi l'énergie potentielle. Il est donc nécessaire de considérer les fortes interactions pour modéliser adéquatement les cuprates, comme discuté en détail à la section 7.

2 Cuprates dopés aux trous

2.1 Diagramme de phases

On ne trouve pas de supraconductivité dans les composés cuprates purs. Pour obtenir la phase supraconductrice, en plus d'abaisser la température, il faut altérer le remplissage électronique naturel des plans CuO_2 , correspondant à un électron par atome de cuivre. Pour ce faire, on ajoute des atomes dopants dans les plans réservoirs (voir figure 2), ce qui capture

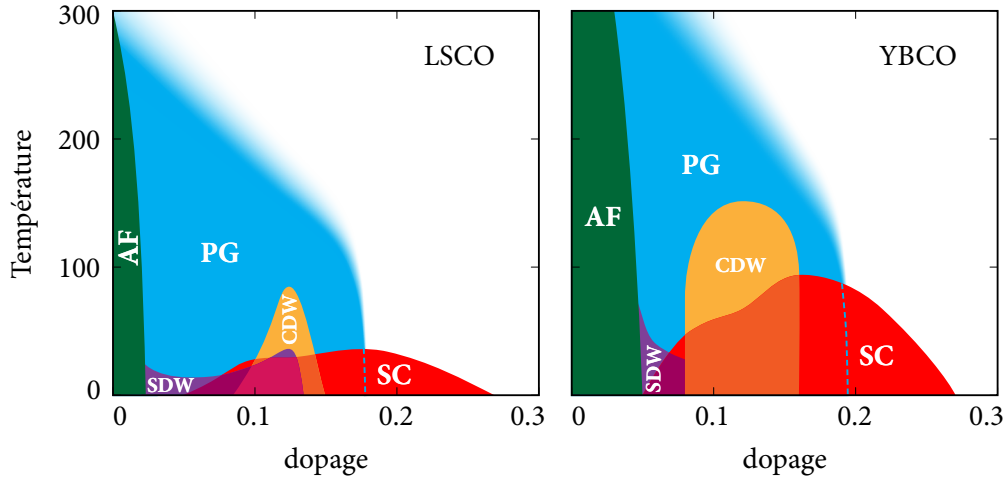


Figure 3. Diagrammes de phases expérimentaux de LSCO et YBCO adaptés des données expérimentales compilées dans la référence [36] pour les températures de transitions de l'antiferromagnétisme (AF), de la supraconductivité (SC), du pseudogap (PG), de l'onde de densité de spin (SDW), et de l'onde de densité de charge (CDW), en fonction du dopage en trou. Bien que les transitions supraconductrice et antiferromagnétique soient bien établies, les positions exactes des autres transitions et la nature des phases en question sont encore débattues.

ou libère des électrons, selon le cas. Le nombre d'électrons ainsi ajoutés ou retirés se nomme «dopage en électrons» ou «dopage en trous», respectivement. Cette thèse se concentre sur les composés dopés aux trous.

La figure 3 présente deux exemples du diagramme de phases de cuprates dopés aux trous. On y voit la température de transition de certaines phases électroniques en fonction du dopage pour YBCO (mentionné plus haut) et $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_2\text{O}$ (LSCO). Notamment, la température critique T_c forme un dôme caractéristique qui se retrouve chez tous les cuprates. On désigne par «dopage optimal» le dopage auquel la T_c est maximale. Les dopages plus faibles et plus élevés que le dopage optimal sont désignés par «sous-dopés» et «surdopés», respectivement.

Les phases les plus importantes du diagramme de phases sont l'antiferromagnétisme (AF) et la supraconductivité (SC). Leurs paramètres d'ordre—paramètres choisis pour être nuls en l'absence des phases associées, signalant donc leurs présences lorsqu'ils sont non nuls—sont le gap supraconducteur Δ (sous certaines conditions²) et l'aimantation alternée, M , respectivement. Ces derniers sont définis à la section 8. Il y a aussi le pseudogap

2. Le gap n'est pas un paramètre d'ordre suffisant en présence de fluctuations, car des fluctuations de phase peuvent éliminer l'ordre supraconducteur sans fermer le gap. Dans le cas échéant, la rigidité superfluide est le paramètre d'ordre de choix. Comme de telles fluctuations ne sont pas considérées dans cette thèse, le gap Δ tiendra le rôle du paramètre d'ordre.

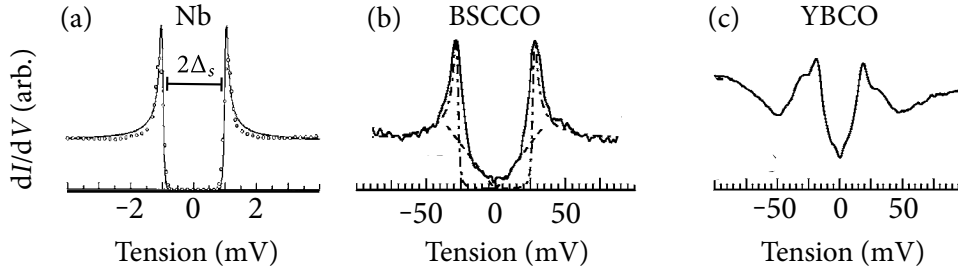


Figure 4. Gaps supraconducteurs mesurés par effet tunnel (a) Gap BCS dans la conductivité différentielle (dI/dV) mesurée par effet tunnel dans le supraconducteur conventionnel Nb. (b) et (c) Gap en «V» mesuré dans YBCO et BSCCO à dopage optimal [39].

(PG), qui demeure suffisamment mystérieux pour ne pas être officiellement reconnu comme définissant une phase. Notamment, on ne reconnaît encore aucun paramètre d'ordre au pseudogap. Les sections 2.3 et 9 s'y attardent plus particulièrement.

Dans la région sous-dopée du diagramme de phase, on retrouve toujours une ou plusieurs phases qui brisent la périodicité originale du cristal. Ces phases dépendent du matériau considéré, étant parfois une onde de densité de spin (SDW, *spin density wave*), une onde de densité de charge (CDW, *charge density wave*) ou un ordre en rayures (*stripes*), combinaison particulière de CDW et SDW dans LSCO. Elles brisent typiquement l'invariance sous translation avec une période de 3 à 5 fois plus grande que celle du plan CuO_2 . La section 3 en donne les détails et la section 10 les définitions mathématiques.

2.2 Supraconductivité de type d

Un des premiers triomphes de la théorie BCS est la prédiction quantitative d'une bande d'énergie interdite (gap) qu'on nomme le gap supraconducteur Δ_s . Un exemple de gap BCS mesuré expérimentalement est illustré à la figure 4(a). La taille du gap correspond à l'énergie nécessaire pour briser les paires de Cooper. Le gap est directement proportionnel à la température critique selon un ratio prédit par la théorie BCS de $2\Delta_s/k_B T_c = 3.53$ [37]. L'importance de cette prédiction fait qu'une fois la présence de paires de Cooper établie pour les cuprates [38], l'étude du gap supraconducteur devient une priorité.

Les expériences d'effet tunnel, en particulier la microscopie à balayage à effet tunnel (STM, *scanning tunneling microscopy*) permettent de directement mesurer le gap [39]. Deux exemples apparaissent à la figure 4, pour YBCO et $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (BSCCO), ce dernier se prêtant particulièrement bien aux expériences de STM parce qu'il se clive facilement.

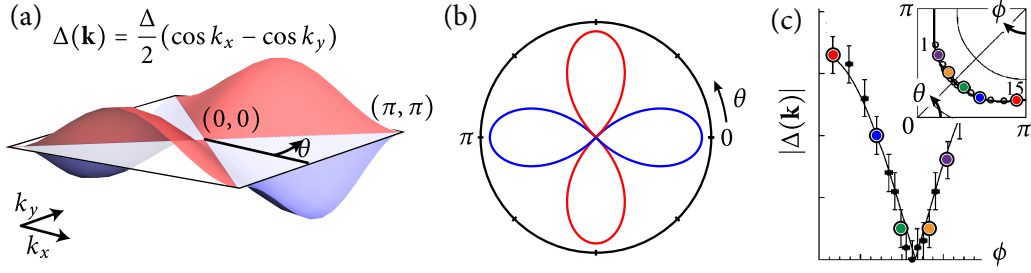


Figure 5. Facteur de forme de type d (a) Fonction $\cos k_x - \cos k_y$ illustrée dans la zone de Brillouin d'un réseau carré. (b) Graphique polaire de $\Delta(\mathbf{k})$ en fonction de l'angle $\theta = \arctan(k_y/k_x)$ à $|\mathbf{k}|$ constant. (c) Expérience d'ARPES démontrant l'anisotropie de type d [43] (figure adaptée de [42]). L'encadré montre la position dans la zone de Brillouin où les gaps sont mesurés le long de la surface de Fermi et permet d'identifier les deux angles θ et ϕ .

Comparé au gap des supraconducteurs conventionnels, celui des cuprates affiche une forme en «V» très exotique. Cette forme vient du fait que le gap est anisotrope, c'est-à-dire qu'il varie en fonction de la direction du vecteur d'onde \mathbf{k} des paires de Cooper. Plus spécifiquement, le gap des cuprates change de signe lors d'une rotation d'un quart de tour. Pour cette raison, on dit que le gap est de type d , référant la symétrie $d_{x^2-y^2}$ de la dépendance en vecteur d'onde du gap. Avec le pas de réseau $a = 1$, cette dernière s'exprime :

$$\Delta(\mathbf{k}) = \frac{\Delta}{2} (\cos k_x - \cos k_y). \quad (1)$$

Cette fonction est illustrée à la figure 5. C'est ce qu'on entend par un gap de type d . Pour distinguer, on dit que le gap isotrope de la théorie BCS—simplement constant en \mathbf{k} —est de type s . L'appellation d ou s vient de l'analogie avec les différentes symétries d'orbitales atomiques, s , p , d , f .

La symétrie d du gap des cuprates fut longtemps débattue. Les premières expériences probantes sont celles d'interférence dans les jonctions Josephson [40, 41]. Les expériences de photoémission résolue en angle (ARPES, *angle-resolved photoemission spectroscopy*) [42] illustrent particulièrement bien l'anisotropie du gap de type d [43], comme illustré à la figure 5(c), mais ne peuvent confirmer le changement de signe associé.

La propriété principale d'un gap de type d est qu'il se ferme dans quatre directions, générant quatre points sur la surface de Fermi où il n'y a pas de gap. On nomme ces points les «noeuds». De plus, vu l'importance de ces quatre points, la portion de l'espace des \mathbf{k} près de ces noeuds est qualifiée de «nodale», et celle loin des noeuds d'«antinodale».

Finalement, le ratio $2\Delta_s/k_B T_c$ dépasse beaucoup 3.53 dans les cuprates. D'une part, cette valeur n'est valide que pour la supraconductivité de type s , mais d'autre part, même

en tenant compte de la symétrie d , le ratio mesuré, variant de 7 à 13 dans les cuprates à base de mercure, par exemple, dépasse substantiellement les prédictions, entre 4 et 5 pour un gap de type d dans la théorie BCS [44]. Bref, le gap est plus grand que ne le laisse prédire la T_c .

2.3 Pseudogap

Le terme «pseudogap» est introduit par Mott [45] en 1968 pour désigner un minimum dans la densité d'états de substances non cristallines. Lee, Rice et Anderson [46] l'utilisent plus tard pour désigner un gap partiel dû aux fluctuations d'une transition de Peierls [47] dans un cristal.

Dans l'étude des cuprates, «pseudogap» désigne plutôt une zone du diagramme de phase. Le pseudogap est un phénomène électronique principalement caractérisé par une perte de densité d'états au niveau de Fermi. En d'autres mots, le pseudogap s'accompagne d'un gap partiel, similaire à un gap supraconducteur, mais en l'absence de supraconductivité. Ce dernier persiste jusqu'à une température notée T^* ou le gap partiel disparaît, bien au-dessus de T_c . Les expériences de résonance magnétique nucléaire, plus précisément les mesures du déplacement de Knight (*Knight shift*) [48, 49], sont les premières à indiquer l'existence du pseudogap. Par la suite, d'innombrables observations lui sont attribuées. La plupart s'estompent de manière tellement progressive qu'elles empêchent d'interpréter T^* comme une transition de phase. Les références [50, 51, 52] sont trois parmi de nombreuses revues de littérature sur le sujet. Comme il est impossible de tout couvrir, cette section ne décrit que quelques propriétés importantes pour la suite.

Les expériences d'effet tunnel [39] permettent de mesurer directement le pseudogap comme un gap incomplet, une dépression, dans la conductivité différentielle au-dessus de T_c . C'est sans doute la signature du pseudogap la plus évocatrice de son nom. Elle est illustrée à la figure 6(a). Cette dépression est centrée au niveau de Fermi et est exactement de même largeur que le gap supraconducteur. De prime abord, le pseudogap semble donc être un reste, un stigmate, du gap supraconducteur. En effet, à T_c le gap perd ses pics de cohérence effilés, mais demeure ouvert, se remplissant progressivement pour ne disparaître en douceur qu'à T^* . Pour certains matériaux, T^* atteint plus de 300 K, et le pseudogap persiste sans difficulté au-delà la température ambiante. Un gap à 300 K sans supraconductivité : voilà comment rendre fous les chercheurs en quête d'un supraconducteur à température ambiante !

Le pseudogap est aussi identifiable par ses arcs de Fermi, illustré à la figure 6(c). Ces arcs existent parce que le pseudogap divise la zone de Brillouin, tel que révélé par les expériences résolues en \mathbf{k} , notamment l'ARPES [42], mais aussi par les résultats de STM en transformée

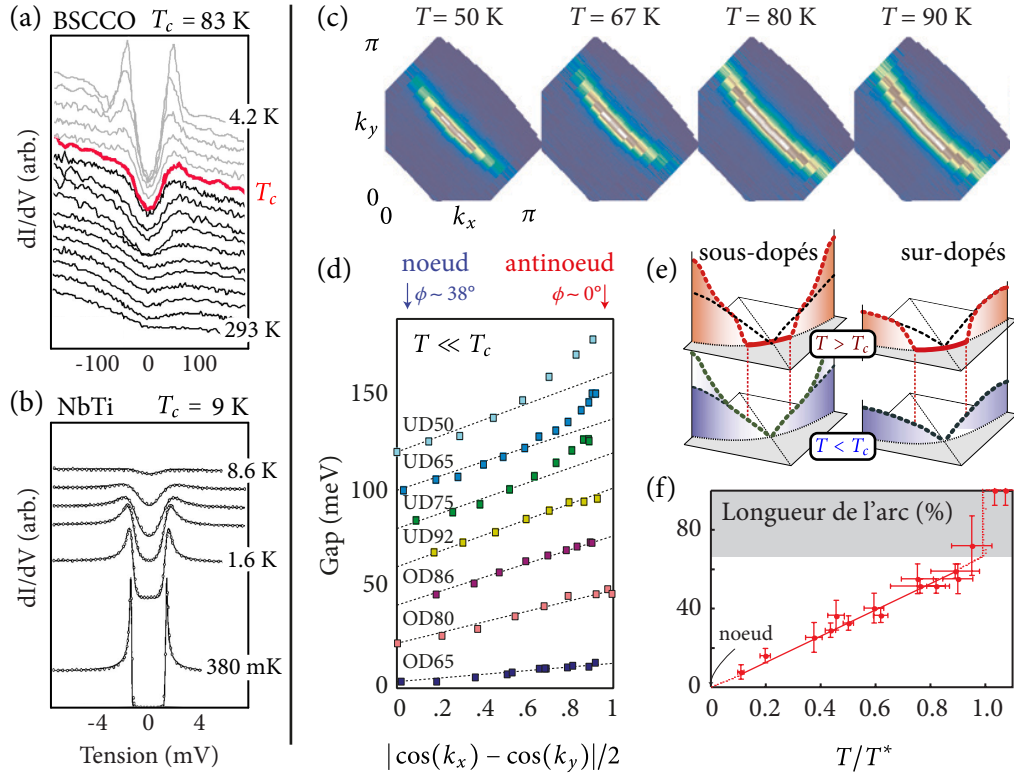


Figure 6. Dichotomie nodale-antinodale en ARPES dans BSCCO (a) Le pseudogap observé par effet tunnel dans un échantillon sous-dopé de BSCCO, laissant une dépression dans la conductivité différentielle (dI/dV) au-dessus de $T_c = 83$ K [39]. (b) Comparaison avec le cas du supraconducteur conventionnel NbTi, où le gap disparaît à $T_c = 9$ K [39]. (c) Arcs de Fermi mesurés par ARPES dans un échantillon sous-dopé de BSCCO avec $T_c = 67$ K. L'échelle de couleur en bleu (minimum), brun et blanc (maximum) indique la densité spectrale [53]. (d) Déviation par rapport au facteur de forme de type d en fonction du dopage, où l'angle ϕ est celui défini à la figure 5 [54]. Le dopage étant difficile à évaluer, on n'indique que si l'échantillon est surdopé (OD, *overdoped*) ou sous-dopé (UD, *underdoped*) avec sa T_c . (e) Schéma de la dichotomie nodale-antinodale mesurée en ARPES [55]. (f) Pourcentages de la surface de Fermi occupée par l'arc en fonction de la température normalisée T/T^* pour cinq échantillons sous-dopés de BSCCO [56].

de Fourier [57, 58, 59]. Au dessus de T_c , le gap supraconducteur se ferme près des noeuds, dans la portion nodale de la zone de Brillouin, mais demeure toutefois ouvert loin du noeud, dans la portion antinodale. La surface de Fermi est ainsi partiellement gappée, formant des arcs : ce sont les arcs de Fermi [60, 61].

Les résultats d'ARPES illustrés aux figures 6(e) et (f) permettent de comprendre les arcs de Fermi comme le résultat de deux gaps distincts : le gap nodal et le gap antinodal. En augmentant la température, les arcs de Fermi s'étendent progressivement en partant

du noeud [61, 53], jusqu'à occuper 70% de la surface de Fermi originale; c'est le gap nodal qui se ferme. Le 30% restant aux antinoeuds demeure gappé jusqu'à T^* [56, 62]; c'est le gap antinodal qui persiste. Le gap antinodal est donc associé à T^* et au pseudogap. La dépendance en dopage des résultats d'ARPES montre d'ailleurs que le gap antinodal augmente en diminuant le dopage, comme T^* . La figure 6(d) montre que, sous T_c , dans les échantillons sous-dopés, le gap antinodal excède le facteur de forme $\cos k_x - \cos k_y$. Les arcs sont donc plus courts à faible dopage.

Enfin, la dépendance en dopage des résultats STM illustrés à la figure 7 suggère un caractère fortement inhomogène pour le pseudogap [58]. Les échantillons sous-dopés présentent une grande variation spatiale dans la taille et la forme du gap. La figure 7(f) le démontre pour BSCCO, avec un gap dont la taille double en seulement 5 nm de l'échantillon, soit une dizaine de mailles élémentaires. La même diversité est présente dans tous les échantillons sous-dopés, mais l'abondance relative des différentes tailles de gap change avec le dopage : le gap moyen s'agrandit à faible dopage [59]. Les gaps d'une même taille sont toutefois indiscernables d'un dopage à l'autre et ils s'apparentent beaucoup au gap moyen de la même taille, obtenu pour un seul dopage (comparer les figures 7(e), (f) et (g)). Cette correspondance entre les gaps locaux et le gap moyen d'un dopage donné est parfois interprétée comme une indication que le dopage n'est pas uniforme dans l'échantillon [63]. Le gap le plus grand est généralement reconnu comme la signature du pseudogap puisqu'il domine les échantillons de faibles dopages.

En résumé, le pseudogap s'accompagne d'un gap partiel persistant au-dessus de T_c , jusqu'à T^* . Il est accompagné d'arcs de Fermi qui s'allongent avec la température, mais laissent la portion antinodale de la zone de Brillouin gappée. Dans la densité d'états locale, la valeur du gap est très inhomogène, laissant croire que le dopage n'est pas distribué uniformément dans le régime pseudogap, dont la signature semble être un gap agrandi.

3 Ondes de densité dans les cuprates

3.1 Ondes de densité de charge

L'ordre en rayures (*stripes*) est le premier ordre découvert brisant la périodicité du cristal dans les cuprates [65]. Les premières expériences démontrant l'existence d'un ordre en rayures sont celles de diffraction des neutrons dans LSCO [66, 67]. Elles dévoilent une onde de densité de charge (CDW, *charge density wave*) de période $4a$ superposée à une onde de densité de spin (SDW *spin density wave*) de période $8a$. Parmi les cuprates, cet ordre est exclusivement observé dans les composés à base de Lanthane, tel le LSCO [68].

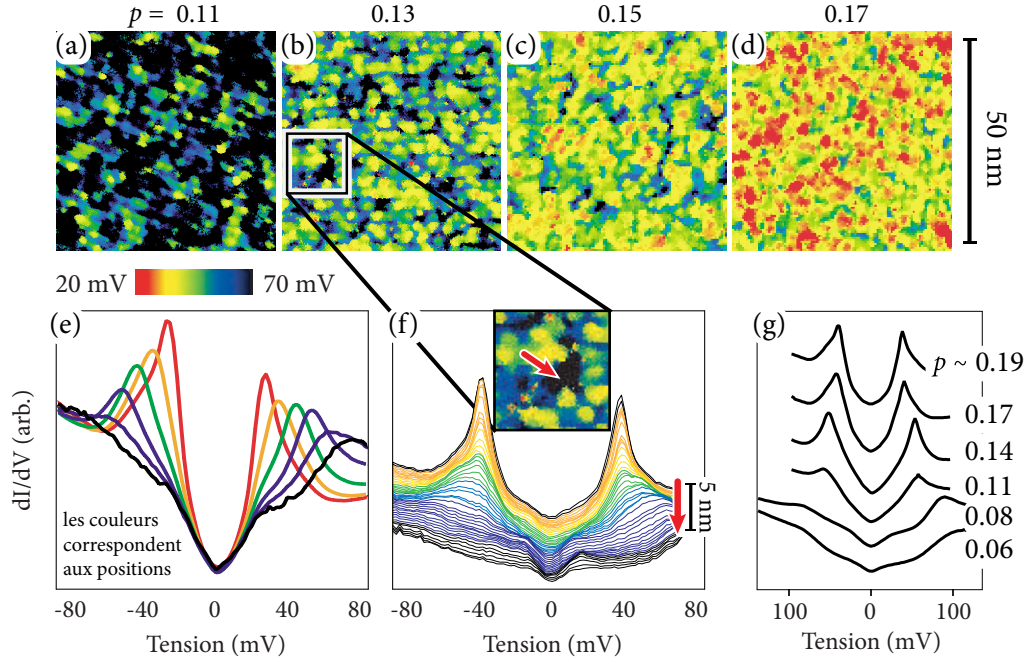


Figure 7. Inhomogénéité du pseudogap en STM dans BSCCO (a) à (d) cartes de la taille du gap (de 20 meV en rouge à 70 meV en noir) mesurée en fonction de la position dans quatre échantillons à dopages p différents. (e) Gaps moyens pour l'ensemble des pixels de même couleur venant des cartes précédentes. [58] (f) Variation du gap suivant une ligne droite de 5 nm [64] (g) Gaps moyens à différents dopages [59]; similaires à ceux observés en se déplaçant dans l'échantillon.

Dans les autres cuprates, l'ordre brisant la périodicité est une onde de densité de charge. En 2002, les premières observations de cette dernière sont obtenues par STM dans BSCCO à dopage optimal en champ magnétique [69]. L'onde de densité est mesurée près des coeurs de vortex, et présente un patron en damier (voir figure 10 de la section 4.1). Ce dernier est ensuite observé sans champ magnétique dans les échantillons sous-dopés [70]. Ce sont toutefois les expériences de rayons X dans YBCO, montrant que l'onde de densité n'est pas un effet de surface, qui éliminent les doutes de la communauté en 2012 [71]. L'ordre de charge est alors reconnu comme une composante universelle du diagramme de phase des cuprates, en compétition avec la supraconductivité.

Les expériences de STM et de rayons X s'accordent désormais sur les subtilités de la forme que prend l'onde de densité de charge. Il s'agit d'une onde de densité (i) unidirectionnelle [73, 75] avec (ii) un facteur de forme d [72, 74] que l'on dénote donc comme l'ordre d FF-DW (*d-form factor density wave*). Sa définition mathématique est donnée à la section 10.3. Les caractéristiques de l'ordre d FF-DW sont établies par les résultats expérimentaux de la figure 8. Premièrement, l'ordre apparaît en domaines où l'oscillation de

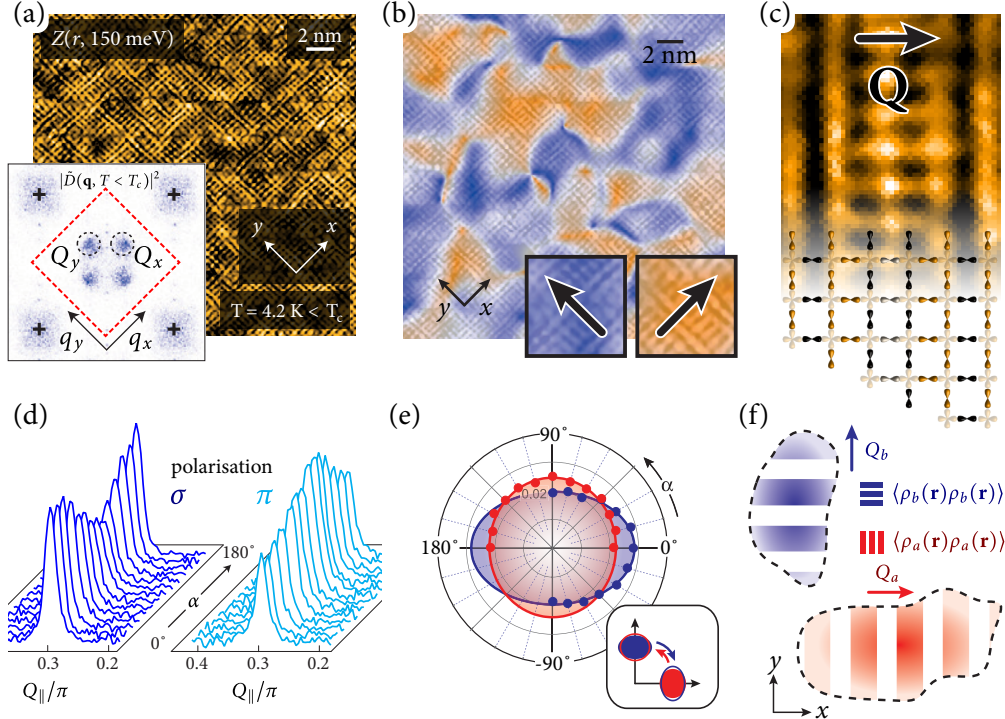


Figure 8. Facteurs de forme et domaines de cohérence de l'onde de densité (a) Carte STM de l'asymétrie électron-trou, $Z(\mathbf{r}, V_0) \equiv (\frac{dI(\mathbf{r})}{dV})_{V=V_0} / (\frac{dI(\mathbf{r})}{dV})_{V=-V_0}$, à basse température. L'encadré montre la carte $\tilde{D}(\mathbf{q})$ composée en masquant certains atomes de la carte $Z(\mathbf{r}, V_0)$, permettant ainsi de prendre la différence des transformée de Fourier pour les atomes d'oxygène en x et en y et d'en garder la partie réelle. Le résultat dans la première zone de Brillouin (losange pointillé rouge) révèle alors la position des vecteurs d'onde Q_x et Q_y de l'onde de densité. Le fait que ces derniers n'apparaissent pas dans la deuxième zone Brillouin (à l'extérieur du losange) révèle le facteur de forme d intra-maille élémentaire [72, 73]. (b) Sur la même carte $Z(\mathbf{r}, V_0)$, masque de couleur calculé pour indiquer la direction Q_x ou Q_y dominante de l'onde de densité en fonction de la position, révélant ainsi le caractère unidirectionnel de l'ordre [73]. (c) Agrandissement d'une période de l'onde de densité en x , accompagné d'un schéma des oxygènes colorés selon leur surplus ou leur déficit de charge. (d) Pic de diffraction des rayons X en fonction de l'angle azimutal α dans plan CuO_2 pour les deux polarisations du faisceau incident. L'amplitude des pics révèle le facteur de forme d [74]. (e) Largeur à mi-hauteur du pic de diffraction pour Q_x en rouge et Q_y en bleu, en fonction de l'angle azimutal, dont l'interprétation est : (f) les domaines de cohérence sont plus longs dans la direction de l'oscillation.

charge domine en x ou en y , révélant son caractère unidirectionnel. Ces domaines peuvent se chevaucher, formant alors une onde bidirectionnelle correspondant à l'ordre en damier observé à l'origine dans les vortex [69, 76]. L'ordre est à très courte portée : la longueur de cohérence des domaines couvre de 2 à 3 périodes de l'onde de densité, c'est-à-dire une dizaine de mailles élémentaires dans le plan, et ils sont allongés dans la direction de l'oscillation [75]. En champ magnétique, toutefois, le volume de cohérence augmente de deux à trois ordres de grandeur, si bien que les domaines de corrélation de l'onde unidirectionnelle deviennent tridimensionnels [77]. Deuxièmement, l'accumulation de charge occupe non les cuivres (Cu), mais les oxygènes (O) du plan CuO_2 , et oscille en antiphase sur l'oxygène en x (O_x) et en y (O_y). C'est ce que dénote le facteur de forme d : à l'intérieur d'une maille élémentaire, lorsqu'un surplus de charge se retrouve sur O_x , un déficit se retrouve sur O_y et vice-versa. Cela cause une brisure de l'invariance sous rotation C_4 , aussi nommée nématicité intra-maille élémentaire (*intra-unit-cell nematicity*).

Le vecteur d'onde \mathbf{Q} de l'ordre d FF-DW dépend du dopage [65]. Le dopage $p = 0.12$ est toujours celui auquel l'amplitude des ondes de densité est maximale. YBCO y présente un vecteur d'onde de $Q = 2\pi \times 0.32$ ce qui est très près de 3 mailles élémentaires par période, et BSCCO y présente un vecteur d'onde de $Q = 2\pi \times 0.25$, soit exactement 4 mailles élémentaires par période. En changeant le dopage, l'ordre devient incommensurable, comme le montre la figure 9. La dépendance en dopage du vecteur d'onde varie aussi d'un composé à l'autre ; la distinction est notable pour les composés YBCO (Y), LSCO (La) et BSCCO (Bi), visibles à la figure 9. Une étude récente des données dans BSCCO suggère toutefois que la courte longueur de cohérence fausserait la mesure du vecteur d'onde et que ce dernier serait en fait toujours commensurable [78].

Enfin, il est important de noter que la condition d'emboîtement (au sens de *nesting*) fut écartée par des expériences d'ARPES et de rayons X sur un même échantillon [79]. La condition d'emboîtement est normalement l'explication la plus simple pour une onde de densité. Elle est atteinte lorsque le vecteur \mathbf{Q} s'emboîte parfaitement entre des portions plates de la surface de Fermi. Le système est alors plus susceptible de s'ordonner selon cette périodicité. La condition d'emboîtement n'est toutefois pas remplie dans les cuprates, où le vecteur d'onde semble plutôt s'emboîter dans les extrémités de l'arc de Fermi du pseudogap [79], comme illustré aux figures 9(b) et (c). Cela suggère donc que le pseudogap est primordial, et l'ordre de charge en est une instabilité secondaire. Cependant, comme montré à la figure 6, la taille des arcs de Fermi change avec la température [53, 56], alors que le vecteur d'onde est constant en température [80]. L'emboîtement parfait dans l'extrémité de l'arc n'est donc atteint que pour une température bien précise. Bref, même pour l'extrémité des arcs de Fermi, la condition d'emboîtement n'est pas suffisante. Il semble nécessaire de

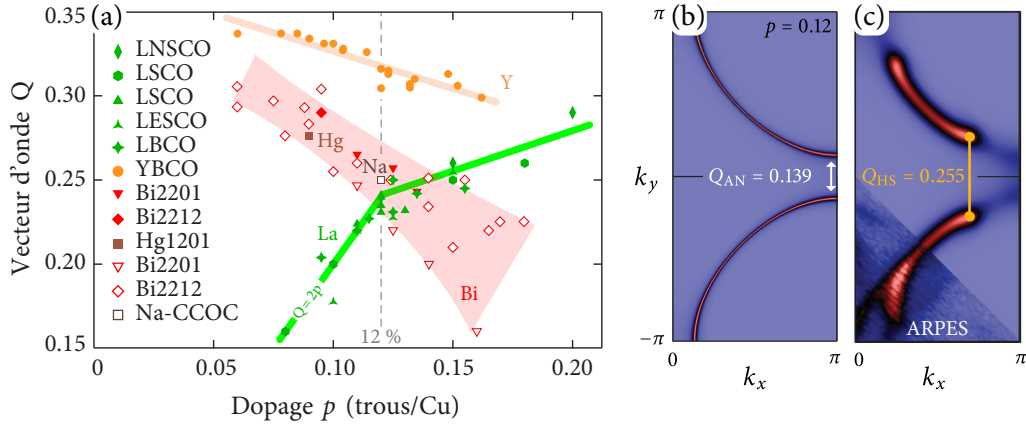


Figure 9. Vecteurs d’onde mesurés par rayons X et STM (a) Compilation des vecteurs d’onde mesurés par diffraction des rayons X ou de neutrons (marqueurs pleins) et par STM (marqueurs vides), figure adaptée de la référence [65]. (b) Surface de Fermi simulée au dopage $p = 0.12$ montrant qu’aucun vecteur d’onde mesuré ne s’y emboîte. (c) Surface de Fermi reconstruite par un pseudogap simulé, ajusté aux données d’ARPES montrées dans le coin inférieur bas, offrant un bon emboîtement du vecteur d’onde mesuré par rayons X dans le même échantillon. Figures adaptées de la référence [79].

tenir compte des interactions fortes explicitement (section 7), ou de suggérer un nouveau type d’emboîtement, faisant intervenir plusieurs vecteurs d’onde $\mathbf{Q}(\mathbf{k})$, comme dans les travaux récents de Patrick Lee et de Catherine Pépin [81, 82].

3.2 Ondes de densité de paires

En plus des hypothèses d’ondes de densité de charge, d’ondes de densité de spin [83] et de flux magnétiques alternés (*staggered flux*) [84, 85], plusieurs hypothèses indiquent qu’une onde de densité de paires (PDW, *pair density wave*) pourrait aussi expliquer l’ordre en damier initialement observé en STM [86, 87] et même constituer une hypothèse pour le pseudogap [88, 89, 81]. La section 10 définit mathématiquement l’onde de densité de paires; il s’agit d’une oscillation spatiale de la densité de paires de Cooper. Notamment, les travaux d’Agterberg et Garaud [90] suggèrent que dans une compétition entre supraconductivité et onde de densité de paires, un vortex favoriserait cette dernière et donnerait naissance à une modulation de charge comme celle des expériences. Il fut aussi souligné que certains résultats d’ARPES s’accordent mieux avec un scénario d’onde de densité de paires pour le pseudogap, qu’un scénario d’onde de densité de charge [81, 91] et plusieurs modèles théoriques pour cuprates sont souvent susceptibles à de tels ordres de paires [92, 93, 91, 94, 95]. Au moment où ces hypothèses sont formulées, elles n’ont toutefois aucun support expérimental.

En 2016, les premiers résultats expérimentaux indiquant l'existence d'une onde de densité de paires dans les cuprates sont publiés [96]. Les auteurs écrasent la pointe d'un STM dans un échantillon sous-dopé de BSCCO de sorte qu'un éclat de l'échantillon y reste collé, et cette dernière devient donc une pointe supraconductrice de type d . On parle alors de microscopie à balayage à effet tunnel Josephson (SJTM, *scanned Josephson tunneling microscopy*). Les mêmes techniques d'analyse par transformée de Fourier ayant servi à caractériser l'ordre d FF-DW indiquent alors une onde du courant Josephson, qui est interprété comme étant une onde de densité de paires à facteur de forme s' (s' PDW) de très faible amplitude. L'oscillation correspond à environ 5% du courant Josephson homogène. C'est un résultat cohérent avec une analyse Ginzburg-Landau de la coexistence entre l'ordre d FF-DW et la supraconductivité de type d [96, 97]. Le champ moyen correspondant est présenté à la section 10.4.

4 Cuprates en champ magnétique

4.1 Sous-structures du gap supraconducteur

Avant de découvrir l'ordre de charge en 2002 [69], la recherche en STM se concentre surtout sur l'étude des coeurs de vortex en champ magnétique. On y observe une anomalie très particulière : des sous-structures dans le gap supraconducteur (SGS, *subgap structures*) [39]. Ces dernières consistent en deux pics à l'intérieur du gap, généralement entre ± 5 meV et ± 10 meV de part et d'autre du niveau de Fermi. Un exemple de telles sous-structures est encadré dans la figure 10. Elles sont observées dans YBCO [98] et BSCCO [99, 100] à dopage optimal, en champ magnétique, près des vortex seulement. L'ordre de charge est découvert plus tard exactement aux positions de ces sous-structures.

La correspondance spatiale entre les sous-structures et l'ordre de charge suggère fortement un lien entre les deux [101]. Après les études en champ magnétique, les sous-structures sont observées à champ magnétique nul, tout comme l'ordre de charge, dans les échantillons sous-dopés de BSCCO [58, 70, 73] (visible à la figure 7(f)). Bref, le champ magnétique n'est pas la clé de leur explication. Les mêmes observations sont refaites en 2016 dans YBCO [102], ravivant l'intérêt pour la question.

Les plus récentes études de coeurs de vortex offrent une grande résolution spatiale du comportement de ces sous-structures [103, 76]. La figure 10 montre les déformations du gap occasionnées par un vortex dans un champ magnétique de 11 T. On y voit diverses déformations, dont les mystérieuses sous-structures. Notamment, le gap au coeur du vortex s'apparente aux gaps observés à champ nul à dopage plus faible (figure 7) et associés au

pseudogap plus tôt. Une interprétation simple est donc que le vortex, en supprimant la supraconductivité, révèle le spectre du pseudogap sous-jacent. Aussi, vu la grande inhomogénéité des cuprates, les vortex auraient tendance à s'ancrer aux positions où la supraconductivité est déjà faible : les positions dominées par le pseudogap.

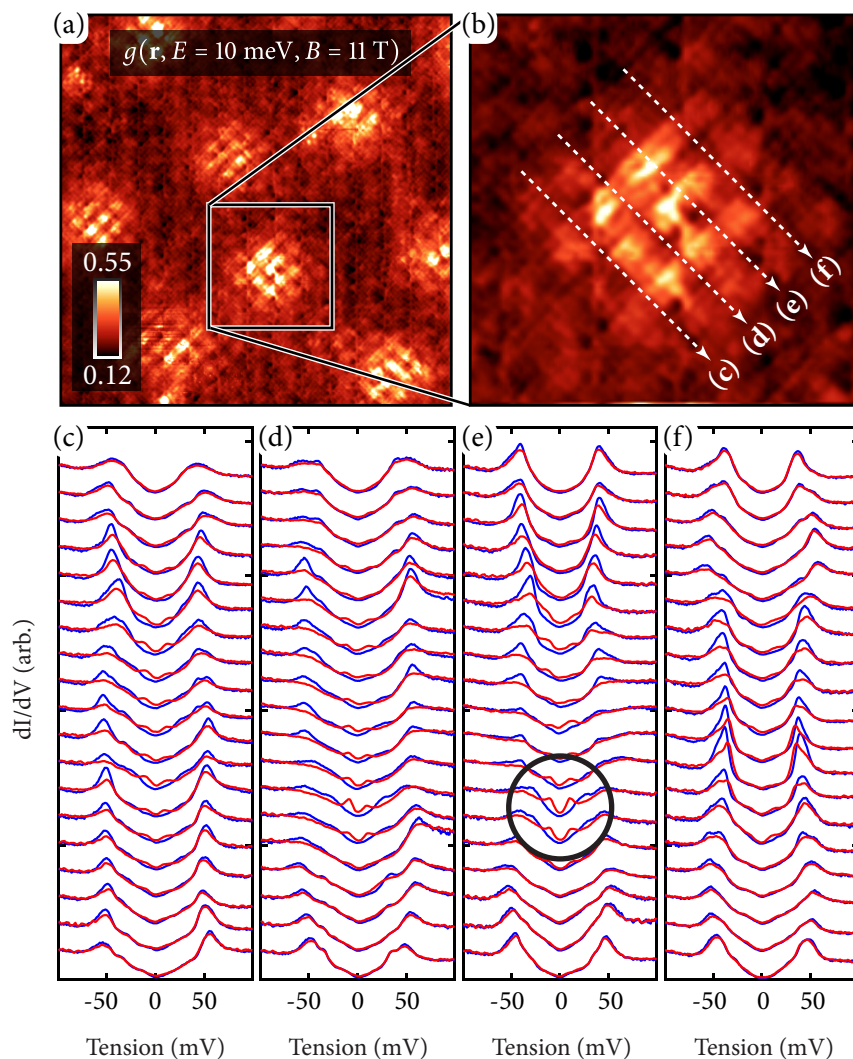


Figure 10. Sous-structures du gap dans les vortex en STM dans BSCCO. Figure adaptée du matériel supplémentaire de la référence [76]. (a) carte de conductivité différentielle à 10 meV, soit l'énergie de la sous-structure. Les oscillations de l'ordre de charge sont alors bien visibles, et révèlent la position des vortex. (b) Agrandissement d'un vortex indiquant les trajectoires présentées aux figures suivantes. (c) à (f) Pour chacune des trajectoires, conductivités différentielles mesurées à chaque position, en bleu sans champ magnétique et en rouge sous un champ de 11 T. Les sous-structures sont encerclées en (e).

4.2 Nombre de Hall

Le dernier résultat expérimental important pour cette thèse est le changement rapide du nombre de Hall au dopage p^* où se termine le pseudogap [104]. L'effet Hall vient du mouvement circulaire des électrons soumis à un champ magnétique qui génère un courant perpendiculaire à une différence de potentiel. Dans l'approximation d'un gaz d'électrons libres, la résistivité associée à ce courant transverse, nommée résistivité de Hall, est donnée par $\rho_{yx} = R_H B$, où B est le champ magnétique. Le coefficient de Hall R_H , lui, est donnée par $-1/ne$, où e est la charge de l'électron et n est la concentration d'électrons dans l'échantillon. L'inverse de R_H peut donc s'interpréter comme un nombre de particules par unité de volume : le nombre de Hall, $n_H \equiv -1/eR_H$. Il se peut que cette approximation soit invalide dans les cuprates à cause des fortes corrélations. Néanmoins, il est très instructif d'interpréter le changement brusque de n_H observé expérimentalement comme une chute du nombre de particules (voir chapitre IV). Enfin, ce changement rapide de n_H fut aussi mesuré dans $\text{La}_{1.6-x}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (Nd-LSCO) et, dans ce cas, l'interprétation d'un changement du nombre de porteurs est compatible avec des mesures de résistivité longitudinale [105].

La figure 11 illustre l'augmentation rapide de n_H mesurée dans les deux composés [104, 105]. Le nombre de Hall y passe brusquement d'une dépendance en p à faible dopage à une dépendance en $1 + p$ au dopage p^* où le pseudogap disparaît. Au-delà de p^* , la dépendance en $1 + p$ est précisément celle attendue pour la surface de Fermi mesurée dans les cuprates. La dépendance en p dans le pseudogap est au contraire surprenante, car elle correspond à celle qu'aurait le système si la zone de Brillouin était réduite de moitié.

Il faut noter que ce qui précède s'applique au nombre de Hall extrapolé à température nulle, $T \rightarrow 0$, soit à l'état fondamental correspondant au pseudogap. Comme on ne peut mesurer l'effet Hall dans un supraconducteur, une telle mesure à basse température doit être faite à champ magnétique élevé. Un champ magnétique élevé supprime la supraconductivité, laissant voir ce qui se passe dans l'état sous-jacent. Que cet état sous-jacent ne soit pas lui-même affecté par le champ magnétique est encore débattu. Dans les matériaux sous-dopés, l'état sous-jacent à la supraconductivité est l'ordre de charge $d\text{FF-DW}$. Un champ magnétique intense fait croître la longueur de corrélation de cet ordre de charge [77, 106, 107]. Or, comme ce dernier est en compétition avec la supraconductivité, il n'est pas surprenant que supprimer la supraconductivité renforce l'ordre de charge. Aux dopages à proximité de p^* , toutefois, l'état sous-jacent est le pseudogap, sur lequel l'effet du champ magnétique n'est pas aussi clair. Le paramètre d'ordre du pseudogap, s'il existe³, est encore inconnu, et il est impossible d'en mesurer une longueur de corrélation comme pour l'onde de charge. En outre,

3. Si le pseudogap est séparé du métal par une transition de premier ordre qui se termine en un point critique, comme suggéré par Sordi et al. [108], un paramètre d'ordre n'est pas nécessaire

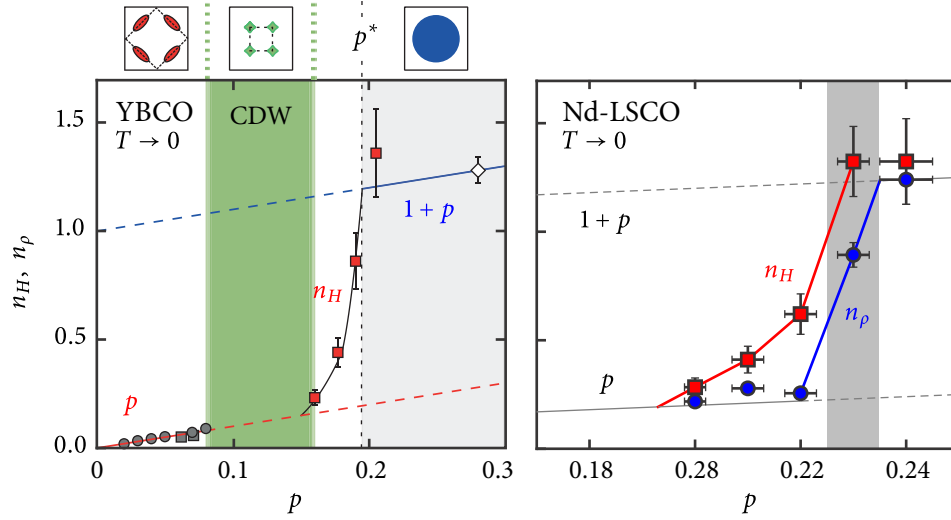


Figure 11. Augmentation rapide du nombre de Hall dans YBCO et Nd-LSCO Résultats expérimentaux adaptés des références [104, 105], montrant le nombre de Hall extrapolé à basse température en fonction du dopage pour (a) YBCO et (b) Nd-LSCO. Dans le cas de Nd-LSCO, on montre aussi les résultats de l'interprétation de la résistivité ρ qui présentent la même chute apparente du nombre de porteurs dans le pseudogap.

un champ magnétique élevé laisse la température de transition T^* du pseudogap inchangée, et pour cette raison on suppose souvent qu'il donne accès au pseudogap sans l'altérer. Dans ces conditions, le changement brusque de n_H en entrant dans l'état fondamental correspondant au pseudogap renforce l'hypothèse qu'il s'agit bien d'une phase électronique.

Le changement rapide du nombre de Hall a reçu beaucoup d'attention de la part des théoriciens, en particulier suite au succès des travaux de Storey [109]. Ce dernier utilise deux modèles : la théorie phénoménologique Yang-Rice-Zhang (théorie YRZ) et un modèle phénoménologique de champ moyen antiferromagnétique (modèle AF) qui reproduisent parfaitement les résultats expérimentaux. Par la suite, Eberlein [110], utilise un modèle phénoménologique très similaire basé sur une onde de densité de spin incommensurable spirale, aussi appelée antiferromagnétisme spirale (modèle sAF) et reproduit aussi les résultats expérimentaux. Plusieurs autres modèles sont ensuite utilisés pour étudier la question : une théorie $FL^* SU(2)$ [111], un modèle de transition nématique [112], la théorie des fluctuations $SU(2)$ [113], et un modèle phénoménologique d'onde de densité de charge [114].

5 Questions étudiées dans cette thèse

Ayant établi le contexte dans lequel s'inscrit cette thèse, voici quatre questions auxquelles nous tenterons de répondre :

Est-ce que les ondes de densité de charge observées expérimentalement (d FF-DW) peuvent causer le pseudogap dans la densité d'états? La réponse courte est : non, car sans emboîtement, les gaps d'onde de densité ne sont pas contraints à rester au niveau de Fermi. Une bonne partie du chapitre III est dédiée à cette question avec les résultats à la section 11.

Est-ce que les ordres d FF-DW ou s' PDW peuvent expliquer les sous-structures du gap supraconducteur observées en STM? La réponse courte est : oui, en particulier l'ordre s' PDW. Le reste du chapitre III porte sur cette question avec les résultats à la section 12.

Est-ce qu'une onde de densité de spin incommensurable colinéaire peut expliquer l'augmentation rapide du nombre de Hall aussi bien que les modèles AF, sAF et YRZ? La réponse courte est : non, car la zone de Brillouin n'y est pas réduite de moitié comme dans les modèles de Storey et d'Eberlein. Une petite partie du chapitre IV est consacrée à cette question avec les résultats à la section 17

Quelles sont les prédictions des modèles AF, sAF et YRZ pour l'effet Seebeck et la chaleur spécifique? La question est posée considérant qu'ils prédisent correctement l'augmentation rapide du nombre de Hall avec l'augmentation du dopage. La réponse courte est : une augmentation rapide de la chaleur spécifique et une chute du coefficient Seebeck, mais pas exactement au dopage p^* . Le chapitre IV est essentiellement consacré à cette question, avec les résultats à la section 18.

CHAPITRE II

NOTIONS FONDAMENTALES

Le rôle de ce chapitre est d'établir le point de départ de tous nos modèles ainsi que le cadre dans lequel seront interprétés les résultats de la thèse. On y donne certaines notions de base : la théorie de Bloch, les paramètres de bandes pour cuprates, ainsi que les champs moyens antiferromagnétique et supraconducteur. L'utilisation de l'approche champ-moyen phénoménologique, utilisée dans la suite, y est justifiée. À la fin du chapitre, certaines hypothèses pour le pseudogap sont classées en deux catégories : celle d'un pseudogap fixé au niveau de Fermi et symétrique particule-trou (type SC) et celle d'un pseudogap non fixé et asymétrique (type AF). Ces deux catégories seront mises en opposition à plusieurs reprises pour analyser les résultats des chapitres suivants.

6 Théorie des bandes de Bloch

6.1 Électrons dans un potentiel périodique cristallin

La théorie de Bloch a une importance double pour cette thèse. Premièrement, il s'agit du point de départ de chaque modèle étudié. Deuxièmement, dans les approximations de type champ-moyen considérées, les ondes de densité étudiées au chapitre III jouent le rôle d'un potentiel externe analogue à un potentiel cristallin. Plusieurs résultats du chapitre III recoupent donc ceux de la théorie de Bloch.

La théorie de Bloch part de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\left(-\frac{P^2}{2m} + V \right) |\psi\rangle = \epsilon |\psi\rangle. \quad (2)$$

La solution recherchée consiste en l'état propre $|\psi\rangle$ et ϵ est l'énergie associée. m est la masse d'un électron, P est l'opérateur quantité de mouvement, et V est l'opérateur de potentiel. Seuls les potentiels périodiques cristallins sont considérés, c'est-à-dire $V(\mathbf{x} + \mathbf{r}) = V(\mathbf{x})$

pour tout vecteur de translation \mathbf{r} d'un réseau de Bravais [115]. Dans la représentation des ondes planes $|\mathbf{q}\rangle$, le potentiel a donc des composantes de Fourier $V_{\mathbf{G}}$ discrètes :

$$\langle \mathbf{q} | V | \mathbf{q}' \rangle = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'-\mathbf{G}} \quad \text{avec :} \quad V_{\mathbf{G}} = \frac{1}{v} \int_v d^2x e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} V(\mathbf{x}), \quad (3)$$

où v désigne le volume d'une maille élémentaire. Les vecteurs \mathbf{G} , définis de sorte que $\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} = 2\pi$, constituent le réseau réciproque. Avec cette expression pour le potentiel, l'équation (2) peut s'écrire comme un produit matriciel, dans lequel les indices matriciels sont les vecteurs \mathbf{G} [115, 116] :

$$\sum_{\mathbf{G}'} \underbrace{\left(\frac{\hbar(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2}{2m} \delta_{\mathbf{G},\mathbf{G}'} + V_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \right)}_{[\hat{H}_{\mathbf{k}}^{\text{Bloch}}]_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}} (\mathbf{k} + \mathbf{G}' | \psi) = \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{G} | \psi), \quad (4)$$

où $[\hat{H}_{\mathbf{k}}^{\text{Bloch}}]_{\mathbf{G},\mathbf{G}'} = \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \left(-\frac{p^2}{2m} + V \right) | \mathbf{k} + \mathbf{G}' \rangle$, avec \hbar la constante de Planck réduite et \mathbf{k} restreint à la zone de Brillouin. Cette forme permet d'identifier la matrice $\hat{H}_{\mathbf{k}}^{\text{Bloch}}$ dont les valeurs propres sont les bandes de Bloch $\epsilon_n(\mathbf{k})$, solutions à l'équation de Schrödinger. Le nombre de bandes est infini, comme la dimension de la matrice, car il y a une infinité de vecteurs \mathbf{G} . Les états propres $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$, eux, sont entièrement déterminés par les coefficients $\langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \psi_n \rangle$, c'est-à-dire les composantes des vecteurs propres de la matrice. Le fait que plus d'un de ces coefficients soit non nul montre que l'état de Bloch $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ est une superposition de plusieurs quantités de mouvement (discuté en détail à l'annexe A.1).

Prenons un exemple simple. En une dimension, les vecteurs du réseau réciproque sont les multiples du vecteur G le plus court. Avec $\hbar = 1$, l'hamiltonien est donc :

$$\hat{H}_k^{\text{Bloch 1D}} = \begin{pmatrix} \ddots & & & \vdots & & & \ddots \\ & \frac{(k-2G)^2}{2m} & V_G & V_{2G} & V_{3G} & V_{4G} & \\ & V_G & \frac{(k-G)^2}{2m} & V_G & V_{2G} & V_{3G} & \\ \dots & V_{2G} & V_G & \frac{k^2}{2m} & V_G & V_{2G} & \dots \\ & V_{3G} & V_{2G} & V_G & \frac{(k+G)^2}{2m} & V_G & \\ & V_{4G} & V_{3G} & V_{2G} & V_G & \frac{(k+2G)^2}{2m} & \\ \ddots & & & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Les résultats de la théorie de Bloch présentés plus loin viennent du bloc 5×5 visible, diagonalisé numériquement pour avoir une approximation du cas infini.

6.2 Approximation des liaisons fortes en seconde quantification

Considérons maintenant une bande de Bloch isolée, c'est-à-dire $\epsilon_n(\mathbf{k})$ pour n fixé. Les états propres $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ associés à cette bande peuvent être représentés en seconde quantification par les opérateurs de création $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ et d'annihilation $c_{\mathbf{k},\sigma}$, définis pour créer et détruire, respectivement, un état de Bloch de spin σ et de vecteur d'onde \mathbf{k} :

$$c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger |0\rangle \equiv |\psi_{n\mathbf{k},\sigma}\rangle \quad \text{avec } n \text{ fixé} \quad (6)$$

Ces opérateurs obéissent aux relations d'anticommuation :

$$\{c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}',\sigma'}\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad \{c_{\mathbf{k},\sigma}, c_{\mathbf{k}',\sigma'}\} = 0. \quad (7)$$

Leurs transformées de Fourier définissent $c_{\mathbf{r},\sigma}^\dagger$ et $c_{\mathbf{r},\sigma}$, permettant de passer de la représentation des \mathbf{k} à la représentation des \mathbf{r} ou vice-versa :

$$c_{\mathbf{r},\sigma} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (8)$$

$$c_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{r},\sigma}. \quad (9)$$

Ces dernières viennent avec les expressions du delta de Kronecker suivantes :

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \quad \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}. \quad (10)$$

Le vecteur \mathbf{k} est restreint à la première zone de Brillouin et N est le nombre de mailles élémentaires dans le cristal de volume $V = Nv$. Enfin, les équations (6) et (8) montrent que $c_{\mathbf{r},\sigma}^\dagger$ crée un état de Wannier :

$$c_{\mathbf{r},\sigma}^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\psi_{n\mathbf{k},\sigma}\rangle \equiv |w_{n\mathbf{r},\sigma}\rangle \quad (11)$$

L'annexe A.1 donne plus de détails sur les représentations \mathbf{r} et \mathbf{k} .

Pour revenir à la bande isolée, exprimons celle-ci $\xi_{\mathbf{k}} \equiv \epsilon_n(\mathbf{k}) - \mu$, c'est-à-dire relativement au potentiel chimique μ . La bande s'écrit alors comme l'hamiltonien effectif suivant :

$$H_0 = \sum_{\mathbf{r},\mathbf{a},\sigma} t_{\mathbf{a}} c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r},\sigma} - \mu \sum_{\mathbf{r},\sigma} c_{\mathbf{r},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r},\sigma} \quad (12)$$

$$= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \quad \text{avec :} \quad \xi_{\mathbf{k}} \equiv \sum_{\mathbf{a}} t_{\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} - \mu. \quad (13)$$

La première ligne (12) est l'expression du hamiltonien dans l'espace des \mathbf{r} : une somme des sauts partant des sites \mathbf{r} du réseau à leurs voisins \mathbf{a} et d'amplitudes $t_{\mathbf{a}}$. Le terme pour $+\mathbf{a}$ étant le conjugué hermitien du terme pour $-\mathbf{a}$, il faut inclure tous les voisins pour que H_0 soit hermitien. La deuxième ligne (13) est l'expression dans l'espace réciproque ; la somme des énergies $\xi_{\mathbf{k}}$ de tous les états \mathbf{k} de la zone de Brillouin. On voit, à droite, que les $t_{\mathbf{a}}$ sont les coefficients de Fourier de la dispersion $\xi_{\mathbf{k}}$. Pour passer d'une forme à l'autre il suffit de substituer les transformées de Fourier (8) ou (9) et d'utiliser les deltas de Kronecker (10).

L'approximation des liaisons fortes consiste à n'inclure que les sauts aux voisins \mathbf{a} les plus proches. Par exemple, prenons un réseau carré en 2 dimensions, au paramètre de maille $a = 1$ de sorte que les vecteurs unitaires $\hat{\mathbf{x}}$ et $\hat{\mathbf{y}}$ correspondent aux vecteurs de base du réseau. Il est alors commun d'écrire $t_{\pm\hat{\mathbf{x}}} = t_{\pm\hat{\mathbf{y}}} \equiv -t$ pour les sauts aux premiers voisins, $t_{\pm(\hat{\mathbf{x}}+\hat{\mathbf{y}})} = t_{\pm(\hat{\mathbf{x}}-\hat{\mathbf{y}})} \equiv -t'$ pour les sauts aux seconds voisins, et ainsi de suite pour t'' , t''' , etc. On obtient ainsi la dispersion :

$$\begin{aligned}\xi_{\mathbf{k}} = & -\mu - 2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) \\ & - 2t'(\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y)) \\ & - 2t''(\cos(2k_x) + \cos(2k_y)) + \dots\end{aligned}\quad (14)$$

6.3 Paramètres de bande pour les cuprates

Dans l'hypothèse où les propriétés des cuprates découlent principalement des plans CuO_2 , la dispersion (14) est une approximation qui a beaucoup de succès [117]. Elle décrit bien le système loin du demi-remplissage, là où l'effet des interactions est diminué. Le tableau 1 donne les valeurs utilisées dans cette thèse pour t' , t'' , etc. avec les références associées.

Tableau 1. Paramètres de bande utilisés dans cette thèse.

	Liechtenstein ¹ 1996 [118, 119, 120]	Kancharla ² 2008 [120]	Allais 2014 [121]	Eberlein 2016 [110]	Storey 2016 [109]	Schabel ³ 1998 [122]
t'/t	-0.3	-0.17	-0.33	-0.35	-0.2	-0.51
t''/t	0.2	0.05	0.03	-	0.13	0.07
t'''/t	-	-	-	-	-	0.05
t''''/t	-	-	-	-	-	-0.06

0. Les paramètres $(t', t'') = (-0.3, 0.2)$ sont notamment utilisés dans la théorie Yang-Rice Zhang (YRZ) [119], présentée à la section 14.4, dans laquelle ils sont accompagnés des facteurs de Gutzwiller qui modifient les paramètres de bande avec le dopage pour simuler l'effet des interactions.

1. Les véritables paramètres de Kancharla $(t', t'') = (-0.17, 0.08)$ sont ici modifiés pour que la singularité de van Hove soit à $p=0.23$.

2. Les paramètres de Schabel ne sont que pour une des deux bandes de la bicouche de YBCO.

En pratique, il y a deux approches pour obtenir les valeurs des paramètres de bande. Elles sont discutées en détail dans la référence [123]. La première est l'approche *ab initio*. Une méthode théorique, par exemple la théorie de fonctionnelle de densité (*density functional theory*, DFT), est utilisée pour calculer les bandes complètes à partir de la structure atomique du composé, et on peut alors ajuster les paramètres de l'équation (14) aux bandes obtenues. En général, procéder ainsi ignore en grande partie les effets des interactions fortes, qui peuvent donc être ajoutés par la suite. Les paramètres de Liechtenstein [118] et Kancharla [120] sont obtenus de cette façon, provenant des études DFT données aux références [124, 125]. La deuxième est l'approche phénoménologique. Il s'agit d'ajuster les paramètres de l'équation (14) aux données expérimentales, habituellement celles d'ARPES. Procéder ainsi tient alors compte de tous les effets d'interactions fortes présents dans les matériaux, mais de manière incontrôlée. Les paramètres de Schabel [122] sont obtenus ainsi pour YBCO. Les références [117, 126, 127] procurent d'autres exemples.

Pour les cuprates surdopés, les résultats de ces deux approches sont très semblables. La seule différence notable est que la largeur de bande, donnée par $8t$, est plus grande dans l'approche *ab initio* que dans l'approche phénoménologique. La valeur de t est typiquement située entre 300 meV et 500 meV dans les résultats DFT (*ab initio*), alors qu'elle est plutôt entre 100 meV et 300 meV dans les résultats d'ARPES (phénoménologique). Cela indique qu'à fort dopage, le principal effet des interactions fortes est d'aplatir la bande.

Puisque les résultats sont semblables et bien établis dans les deux approches, il est commun dans la littérature de voir des paramètres choisis arbitrairement pour ressembler à ceux qui seraient obtenus rigoureusement. C'est le cas des paramètres d'Allais et d'Eberlein [121, 110]. L'important est que leurs surfaces de Fermi ressemblent à celles obtenues de paramètres rigoureux dans l'intervalle $0 < p < 0.3$, comme illustré à la figure 12. Une étude récente [128] réduit d'ailleurs les paramètres de bande t' et t'' à seulement quelques classes d'équivalence, ce qui permet de grouper les différentes familles de cuprates. Notamment, dans cette classification, LSCO se retrouve dans une classe à part.

Enfin, pour les paramètres de bande $(t, t') = (-0.17, 0.05)$, on s'intéressera particulièrement à la singularité de van Hove. À la figure 12(b), on voit qu'entre les dopages $p = 0.2$ (en vert) et $p = 0.3$ (en bleu), la surface de Fermi passe d'une forme circulaire centrée à (π, π) à une forme en diamant centrée à $(0, 0)$. Le dopage exact où se produit ce changement est $p_{\text{VHS}} = 0.23$. À ce dopage, le niveau de Fermi croise un col dans la fonction $\xi_{\mathbf{k}}$, ce qui définit une singularité de van Hove (vHS, *van Hove singularity*). Pour tous les autres ensembles de paramètres, la singularité de van Hove est à dopage plus élevé, au-delà de $p = 0.3$.

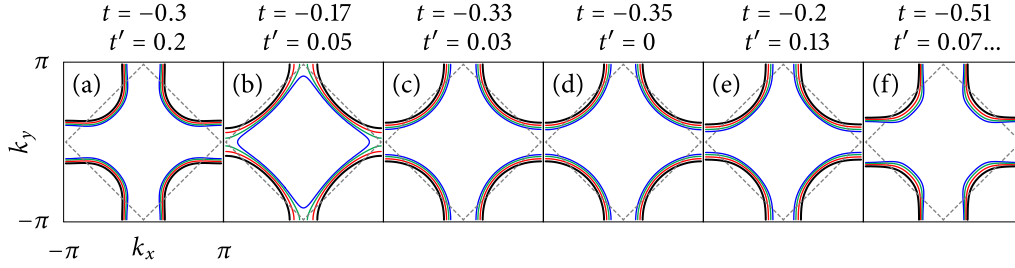


Figure 12. Surfaces de Fermi pour différents paramètres de bande (voir tableau 1)
 (a) Liechtenstein, (b) Kancharla, (c) Allais, (d) Eberlein, (e) Storey, et (f) Schabel.
 Quatre dopages sont présentés : $p = 0$ en noir, $p = 0.1$ en rouge, $p = 0.2$ en vert,
 et $p = 0.3$ en bleu. La frontière de la zone de Brillouin antiferromagnétique est en
 pointillé. En (b), la singularité de van Hove pour les paramètres de Kancharla est à
 $p_{\text{vHS}} = 0.23$. C'est la seule dans le domaine de dopage étudié.

7 Corrélations fortes

7.1 Modèle de Hubbard

Le rôle des interactions électron-électron est particulièrement important dans les cuprates, comme en témoigne la phase isolante de Mott à demi-remplissage. L'hypothèse est donc qu'elles sont à l'origine de tous les ordres exotiques observés dans les cuprates [17, 129]. Le modèle le plus simple pour tenir compte des interactions électron-électron est le modèle de Hubbard [130] :

$$H^{\text{Hubbard}} = H_0 + U \sum_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r},\uparrow} c_{\mathbf{r},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r},\downarrow}. \quad (15)$$

La partie H_0 décrit la bande de Bloch et le terme U décrit la répulsion forte entre les électrons. Pour simplifier les choses, cette répulsion n'intervient que si deux électrons occupent le même site \mathbf{r} du réseau. Bref, H_0 modélise bien le déplacement des électrons sur les plans CuO_2 et U simule bien l'interaction forte à laquelle les électrons sont soumis sur l'atome de cuivre. Le modèle de Hubbard à deux dimensions, par sa simplicité, est donc un favori pour expliquer les cuprates [131, 129, 132].

Le modèle de Hubbard à deux dimensions constitue toutefois un problème mathématique très difficile. Il n'a pas de solution analytique connue et son espace de Hilbert croît exponentiellement (4^N) avec le nombre de site N , rendant les méthodes numériques exactes limitées à de très petits systèmes. De plus, le signe négatif de la statistique des fermions fait que les approches Monte-Carlo standards convergent exponentiellement lentement. La *Simons collaboration on the Hubbard model* [133], donne un aperçu des plus récents consensus vers une compréhension de sa solution. On y compare plusieurs méthodes d'approximation

numériques, permettant d'établir certains résultats robustes. On y conclut toutefois que parmi les régimes de paramètres considérés, ceux pour lesquels subsiste la plus grande incertitude sont exactement ceux qui s'appliquent aux cuprates : couplage intermédiaire $4 < U/t < 8$ et faible dopage en trous. Bref, non seulement le modèle favori pour les cuprates est un problème difficile, son régime d'intérêt est aussi son régime le plus difficile.

7.2 Symétries brisées

Certaines transformations laissent le modèle de Hubbard inchangé. Par exemple, une translation par un vecteur du réseau, une transformation du groupe ponctuel du cristal, ou un changement de l'orientation du spin laissent le modèle invariant. Ce sont des exemples de «symétries» du modèle. En présence d'interactions, certains états présentant des corrélations spatiales qui violent une de ces symétries peuvent devenir favorables énergétiquement. Prenons l'exemple du mécanisme de super-échange. Ce dernier pousse les spins à s'orienter à l'opposé des spins voisins, favorisant donc des états antiferromagnétiques (... $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$...) qui brisent l'invariance par translation. La symétrie du modèle s'exprime alors à travers la dégénérescence de ces états—l'axe dans lequel les spins alternent est libre et toutes les orientations sont dégénérées. Cependant, il y a toujours, dans un système réel, un champ infinitésimal favorisant légèrement un de ces états dégénérés, et dans la limite statistique avec interaction, cet état devient infiniment avantageux. Le système se retrouve donc spontanément dans un seul de ces états fondamentaux ; c'est ce qu'on appelle une brisure spontanée de symétrie. Notons qu'à moins de connaître à l'avance comment la symétrie sera brisée, il est très difficile de prédire une brisure spontanée de symétrie.

Une fois la symétrie brisée, le système s'ordonne dans un nouvel état qui peut être décrit par une approche champ-moyen simple. La supraconductivité de type *d* et l'antiferromagnétisme sont deux exemples d'ordres à symétries brisées, présents dans les cuprates, et pour lesquels on peut écrire des modèles de type champ-moyen (section 8.1 et 8.2). De tels modèles décrivent le système en termes d'excitations émergentes qui se comportent généralement comme des particules libres, permettant de s'affranchir des interactions.

Il est toutefois essentiel de pouvoir motiver l'utilisation de telles approches par un mécanisme. Le mécanisme de l'antiferromagnétisme est le super-échange et, pour la théorie BCS, il s'agit de l'interaction électron-phonon, qui mène à une attraction effective rendant favorable la brisure spontanée de la symétrie de jauge. Pour les ordres présents dans les cuprates, l'hypothèse est que le mécanisme viendra de l'interaction électron-électron U du modèle de Hubbard, probablement via des fluctuations de spin. Plusieurs méthodes

numériques procurent d'ailleurs des exemples de brisures spontanées de symétries dans le modèle de Hubbard. La supraconductivité de type d et l'antiferromagnétisme sont probablement les plus étudiés [134, 135, 136, 120, 137], et selon la méthode utilisée, le diagramme de phase obtenu est souvent très proche de celui des cuprates. Toutefois, les méthodes utilisées sont souvent biaisées dans leur recherche de symétries brisées. Elles sondent des ordres spécifiques, souvent contraints à des formes simples, ce qui empêche de sonder le système pour trouver des ondes de densité d'une complexité comparable à celle observée dans les cuprates (section 3). Les méthodes libres de ces biais, par exemple le groupe de renormalisation, ont le défaut d'être moins bien adaptées aux grandes valeurs de U des cuprates. Elles trouvent cependant plusieurs ondes de densité incommensurables proches en énergie et très sensibles aux paramètres de bande et au dopage [138, 139, 140]. Il est donc tout à fait plausible que les ordres inhomogènes observés expérimentalement soient accessibles au modèle de Hubbard, et qu'il faille simplement libérer les méthodes à couplage fort de leur biais pour les trouver systématiquement.

Dans les cuprates, plusieurs signatures de symétries brisées sont observées près de T^* . Certaines expériences de diffraction des neutrons, par exemple, indiquent l'existence d'un ordre magnétique intra-maille élémentaire, c'est-à-dire qui ne brise pas la périodicité du cristal [141]. Cet ordre suggère une brisure de l'invariance sous inversion du temps, qui est aussi supportée par les expériences d'effet Kerr [127, 142]. De plus, des expériences de génération de seconde harmonique optique suggèrent qu'une brisure de la symétrie d'inversion existe sous T^* [143]. Enfin, en plus de la nématicité intra-maille élémentaire mentionnée à la section 3.1 pour l'ordre d FF-DW, les mesures d'anisotropie dans la résistivité et l'effet Nernst suggèrent qu'une deuxième forme de nématicité prendrait forme à plus haute température, un peu sous T^* [144]. Les brisures de symétries candidates pour le pseudogap sont donc nombreuses.

7.3 Justification de l'approche phénoménologique

Considérant (i) que le modèle de Hubbard est difficile à résoudre, (ii) qu'il semble être justifié pour les cuprates, (iii) qu'il est si riche en états à symétries brisées et (iv) qu'il est particulièrement difficile de prédire une brisure de symétrie sans la connaître préalablement; on choisit ici de simplement sauter l'étape de la motivation par le modèle de Hubbard, et d'étudier directement certains hamiltoniens effectifs sans interactions qui reproduisent bien les résultats expérimentaux. De plus, la présence d'ordre à longue portée a tendance à restaurer les quasi-particules comme description appropriée des excitations élémentaires, ce qui justifie l'utilisation d'hamiltoniens effectifs. C'est l'approche phénoménologique.

Évidemment, un éventuel succès dans cette entreprise, c'est-à-dire un hamiltonien à une particule qui décrirait toutes les expériences, devra être doté subséquemment d'une justification rigoureuse, par un mécanisme réaliste, présent dans les cuprates. Cette thèse explore les modèles phénoménologiques suivants :

- le champ moyen antiferromagnétique (section 8.1),
- le champ moyen supraconducteur (section 8.2),
- le champ moyen d FF-DW (section 10.3),
- le champ moyen s' PDW (section 10.4),
- les modèles AF et sAF ; cas particuliers d'antiferromagnétisme (sections 14.1 et 14.2),
- le champ moyen d'antiferromagnétisme incommensurable colinéaire (section 14.3),
- la théorie YRZ (section 14.4).

Ces modèles divers permettent tous une comparaison exhaustive avec l'expérience à faible coût. Ils sont pour la plupart, mais pas tous (détails à la section 8.3), des modèles qui brisent une ou plusieurs symétries.

L'objectif de l'approche n'est pas de trouver la provenance des ordres contenus dans ces modèles ni de défendre un modèle en particulier. Il s'agit plutôt de comprendre quelles expériences tel ou tel modèle peut expliquer ou non. Cela permet d'identifier les forces et les faiblesses de ces modèles. En quelque sorte, il s'agit d'une étude des modèles eux-mêmes. L'idée est qu'en se plaçant au premier rang lors de l'échec d'un modèle donné (l'incapacité à expliquer une expérience), on se met alors dans la meilleure position pour comprendre ce qui rend le problème difficile, facilitant l'élaboration d'un meilleur modèle.

8 Antiferromagnétisme, supraconductivité et pseudogap

8.1 Antiferromagnétisme

Le premier modèle d'intérêt est le modèle de champ moyen antiferromagnétique. Sur les sites du réseau, l'antiferromagnétisme est l'alternance en damier de la projection du spin électronique ; c'est un cas particulier d'onde de densité de spin. On considère toujours le champ moyen en combinaison avec la bande H_0 de l'équation (13), c'est-à-dire $H_0 + H_Q^{\text{AF}}$ sans termes d'interactions supplémentaires. Le terme exprimant le champ moyen

antiferromagnétique dans les représentations \mathbf{r} et \mathbf{k} est donné par :

$$H_{\mathbf{Q}}^{\text{AF}} = \sum_{\mathbf{r}, \sigma} \frac{\sigma M}{2} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r}, \sigma} + \text{c.h.} \quad (16)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\sigma M}{2} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} + \text{c.h.} \quad (17)$$

où $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ et le spin prend les valeurs $\sigma = \pm 1$ correspondant à up (\uparrow) ou down (\downarrow). L'alternance en damier du spin est décrite par un nouveau réseau dont la maille élémentaire est deux fois plus grande que celle du réseau original. En conséquence, on peut définir une nouvelle zone de Brillouin, la zone de Brillouin réduite (rBZ, *reduced Brillouin zone*), deux fois plus petite que la zone de Brillouin originale. En limitant la somme sur \mathbf{k} à cette zone de Brillouin réduite (\mathbf{Q} est un vecteur du nouveau réseau réciproque) :

$$\sum_{\mathbf{k}} (\cdots)_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k} \in \text{rBZ}} ((\cdots)_{\mathbf{k}} + (\cdots)_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}), \quad (18)$$

et en remarquant que tous les termes ont la périodicité de la zone de Brillouin originale, ce qui permet de substituer $\mathbf{k} + 2\mathbf{Q} \rightarrow \mathbf{k}$, on peut exprimer l'hamiltonien sous la forme matricielle suivante :

$$H_0 + H_{(\pi, \pi)}^{\text{AF}} = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{rBZ}} (c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^{\dagger}) \underbrace{\begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \sigma M \\ \sigma M & \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{pmatrix}}_{\equiv \hat{H}_{\mathbf{k}}^{\text{AF}}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}, \sigma} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Les valeurs propres de la matrice $\hat{H}_{\mathbf{k}}^{\text{AF}}$ définie ci-dessus sont :

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2}\right)^2 + M^2}. \quad (20)$$

Ce sont les bandes antiferromagnétiques. La transformation unitaire $\hat{U}_{\mathbf{k}}$ qui diagonalise l'hamiltonien, c'est-à-dire $E_{n\mathbf{k}} = \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{H}_{\mathbf{k}}^{\text{AF}} \hat{U}_{\mathbf{k}}$, où $n = \pm$, mène aux particules propres annihilées par $a_n = [\hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger}]_{n,1} c_{\mathbf{k}} + [\hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger}]_{n,2} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$. L'état propre est donc un électron en superposition des vecteurs d'onde \mathbf{k} et $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$, de façon analogue à l'état de Bloch, qui est en superposition de tous les $\mathbf{k} + \mathbf{G}$.

8.2 Supraconductivité

L'hamiltonien de type champ-moyen pour la supraconductivité de la théorie BCS est le suivant. Dans la théorie complète, il est obtenu des interactions électron-phonon, étape qu'on ignore ici. Le champ moyen de type s dans les représentations \mathbf{r} et \mathbf{k} est :

$$H^{sSC} = \Delta_s \sum_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r},\downarrow}^\dagger + \text{c.h.} \quad (21)$$

$$= \Delta_s \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger + \text{c.h.} \quad (22)$$

Dans les cuprates, le gap est de type d et donc l'hamiltonien est différent. On soupçonne que ce sont les fluctuations antiferromagnétiques plutôt que les interactions électron-phonon qui causent l'appariement [132], mais ce n'est pas confirmé. L'hypothèse généralement acceptée comme champ moyen supraconducteur de type d des cuprates est :

$$H^{dSC} = \sum_{\mathbf{r}} \frac{\Delta}{4} \left((c_{\mathbf{r}+\hat{x},\uparrow} c_{\mathbf{r},\downarrow} - c_{\mathbf{r}+\hat{x},\downarrow} c_{\mathbf{r},\uparrow}) - (c_{\mathbf{r}+\hat{y},\uparrow} c_{\mathbf{r},\downarrow} - c_{\mathbf{r}+\hat{y},\downarrow} c_{\mathbf{r},\uparrow}) \right) + \text{c.h.} \quad (23)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{2} (\cos k_x - \cos k_y) c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} + \text{c.h.} \quad (24)$$

où \hat{x} et \hat{y} correspondent au pas de réseau en x et en y respectivement, puisque $a = 1$. En combinaison avec H_0 , (22) ou (24) peuvent se réexprimer comme :

$$H_0 + H^{s/dSC} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}}^* \\ \Delta_{\mathbf{k}} & -\xi_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix}}_{\equiv \hat{H}_{\mathbf{k}}^{SC}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}, \quad (25)$$

avec $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_s^*$ pour le cas de type s et $\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta}{2} (\cos k_x - \cos k_y)$ pour le cas de type d . Le terme résiduel $\sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}$ est constant et peut être ignoré. Cette façon d'exprimer l'hamiltonien supraconducteur est connue comme le formalisme de Nambu. Le spineur

$$\Psi_{\mathbf{k}} \equiv \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} \quad (26)$$

est le spineur de Nambu, un opérateur d'annihilation à deux composantes qui obéit aux relations d'anticommutation canoniques.

Pour la suite, on présume que $\Delta_{\mathbf{k}}$ est réel et que la dispersion $\xi_{\mathbf{k}}$ est paire en vecteur d'onde : $\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{-\mathbf{k}}$. La transformation unitaire qui diagonalise la matrice hamiltonienne $\hat{H}_{\mathbf{k}}^{SC}$ de l'équation (25) est connue comme la transformation de Bogolioubov-Valentin. Elle

mélange les électrons et les trous :

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \\ \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (27)$$

avec la contrainte $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. Les excitations propres, gouvernées par $\alpha_{\mathbf{k},\sigma}$ et $\alpha_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$, sont connues sous le nom de bogolioubons. Leur dispersion est donnée par les énergies propres :

$$\pm E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}. \quad (28)$$

La convention de préfacteurs choisie dans les hamiltoniens (21) à (24) est telle que les pics de cohérence du gap supraconducteur se retrouvent toujours aux énergies $\pm\Delta$. Le gap a une largeur 2Δ et est centré au niveau de Fermi. Comme les gaps mesurés par effet tunnel dans YBCO ou BSCCO à dopage optimal sont d'environ $\Delta \approx 30$ meV [39], la valeur du champ moyen Δ attendue dans les cuprates est de $\Delta = 0.12t$ (supposant que $t = 250$ meV).

Pour exprimer l'état fondamental supraconducteur, il faut remarquer que le vide de Nambu, c'est-à-dire l'état pour lequel $\Psi_{\mathbf{k}}|\Omega\rangle = 0$, est donné par $|\Omega\rangle = \prod_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger |0\rangle$. Dans l'espace de Nambu à deux composantes, le spineur propre est celui défini à l'équation (27); ses composantes annihilent les états propres. La deuxième composante de son conjugué hermitien, qui est $\alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}$, est donc l'opérateur création pour l'état d'énergie $-E_{\mathbf{k}}$. En remplissant tous les états d'énergie négative à l'aide de ce dernier, $|\text{SC}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow} |\Omega\rangle$, on obtient l'état fondamental supraconducteur :

$$|\text{SC}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^* - v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger) |0\rangle. \quad (29)$$

Il s'agit d'un état cohérent (dont la phase quantique est fixée) pour lequel le nombre de paires de Cooper n'est pas défini et n n'est plus un bon nombre quantique.

Comme les excitations propres du hamiltonien sont des mélanges d'électrons et de trous, l'état électronique est mutilé; il est en superposition à deux énergies. Le formalisme de Green offre une formulation particulièrement claire de ce phénomène. La fonction de Green de l'état supraconducteur s'écrit directement de la matrice hamiltonienne $\hat{H}_{\mathbf{k}}^{\text{SC}}$:

$$\hat{G}_{\mathbf{k}}^R(\omega) = [(\omega - i\eta)\mathbb{1} - \hat{H}_{\mathbf{k}}^{\text{SC}}]^{-1} \quad (30)$$

$$= \frac{1}{(\omega - i\eta)^2 - (\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2)} \begin{pmatrix} \omega - i\eta + \xi_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}}^* \\ \Delta_{\mathbf{k}} & \omega - i\eta - \xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (31)$$

avec la limite $\eta \rightarrow 0$ implicite. La fonction de Green permet de calculer le poids spectral $A_{\mathbf{k},\uparrow}(\omega) \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{G_{\mathbf{k},\uparrow}^R(\omega)\}$ pour l'électron de vecteur d'onde \mathbf{k} et de spin up, $G_{\mathbf{k},\uparrow}^R(\omega)$ étant

le premier élément de la matrice (31). Un peu de travail mène à :

$$A_{\mathbf{k},\uparrow}(\omega) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \delta(\omega + E_{\mathbf{k}}). \quad (32)$$

Cette expression montre qu'une portion de l'électron est à l'énergie $E_{\mathbf{k}}$ et une autre est à $-E_{\mathbf{k}}$; il est donc superposé de part et d'autre du gap. Les facteurs pondérant cette superposition révèlent qu'elle n'est équilibrée qu'à proximité du gap. Loin du gap, la fraction $\xi_{\mathbf{k}}/E_{\mathbf{k}}$ tend vers 1 et annule un des deux termes : l'électron redevient asymptotiquement l'état propre.

8.3 Théories du pseudogap

Le problème des cuprates n'est plus vraiment d'y comprendre la supraconductivité. Il est bien établi que la supraconductivité de type d dans les cuprates peut être décrite par le champ moyen de la section précédente, et l'hypothèse selon laquelle les fluctuations de spins en fourniront le mécanisme d'origine est une favorite. Il demeure toutefois impossible de confirmer cette hypothèse, parce qu'on ne comprend pas bien l'état normal duquel émerge la supraconductivité ; le pseudogap. On ne peut donc pas décrire les fluctuations de spins dans ce dernier, qui mèneraient à la supraconductivité selon l'hypothèse. Bref, la véritable énigme des cuprates est le pseudogap.

Pour expliquer le pseudogap, plusieurs hypothèses sont présentées dans la littérature. Parmi ces hypothèses, certaines ne cherchent à expliquer que quelques observations expérimentales, alors que d'autres tentent de tout expliquer. Certaines de ces hypothèses font partie des modèles phénoménologiques énumérés à la section 7.3 : l'onde de densité d FF-DW (section 10.3), l'onde de densité de paires s' PDW (section 10.4), le modèle antiferromagnétique de Storey [109] (section 14.1), le modèle d'antiferromagnétisme incommensurable spiral d'Eberlein [110] (section 14.2), l'onde de densité de spin incommensurable colinéaire (section 14.3) et la théorie Yang-Rice-Zhang (YRZ) [119] (section 14.4). D'autres théories connues auxquelles nous référons dans cette thèse sont celles des ondes de paires $2k_F$ (*Amperean pairing*) de Patrick Lee [81], la théorie SU(2) de Catherine Pépin [82], et la théorie FL* de Subir Sachdev [145, 146]. Et enfin, certaines autres sont dignes de mention même si nous ne les considérerons pas davantage : la théorie des boucles de courant de Varma [147, 148], l'ordre d -density wave [149, 150], la théorie des fluctuations SO(5) [151] et ses variantes (par exemple O(6) [152]), la théorie de flux alternés [153, 154], etc.

Les hypothèses pour le pseudogap n'impliquent pas toutes des brisures de symétries. Tout comme les interactions causent la phase isolante de Mott, et ce sans briser de symétrie, il est possible que toutes les propriétés du pseudogap soient de simples conséquences des

interactions. Le pseudogap serait alors l'état normal du système, et la transition à p^* une illusion (en comparaison à une véritable transition de phase), conséquence de certains changements dans cet état normal. Toutes les phases à symétries brisées observées seraient alors des instabilités secondaires de cet état normal. Cette hypothèse est extrêmement bien défendue par les résultats de méthodes numériques pour électrons fortement corrélés appliquées au modèle de Hubbard. En particulier, les méthodes basées sur les extensions de la théorie du champ moyen dynamique (DMFT, *dynamical mean field theory*), démontrent un accord qualitatif très exhaustif avec les expériences [129, 155]. Ces approches ont cependant certains problèmes. Elles sont extrêmement exigeantes d'un point de vue du calcul numérique, rendant un accord quantitatif avec les nombreuses familles de cuprates hors de question, et il y a plusieurs de ces approches, auxquelles il est souvent difficile de se familiariser, chacune avec ses avantages et inconvénients. Bref, les approches numériques sont un terrain fertile, mais il est encore difficile d'y trouver un consensus sur la forme exacte que prend le pseudogap, en particulier aux échelles de faibles énergies, c'est-à-dire celles des expériences à basse température. Pour cette raison, il existe aussi des modèles simplifiés cherchant à approximer cet état normal issu des interactions fortes qui serait le pseudogap. L'exemple le mieux connu est probablement la théorie phénoménologique Yang-Rice-Zhang (section 14.4) qui ne brise aucune symétrie.

9 Gaps de type AF ou de type SC

Peu importe quelle sera la théorie du pseudogap, elle devra expliquer le gap partiel apparaissant dans la densité d'états au niveau de Fermi. Une voie simple pour obtenir un gap en mécanique quantique est celle de l'anti-croisement. Lorsqu'un terme du hamiltonien introduit un couplage entre l'état d'énergie $\xi_{\mathbf{k}}$ et celui, par exemple, d'énergie $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$, comme c'est le cas dans la matrice (19) du champ moyen antiferromagnétique, le gap apparaît au point de croisement déterminé par $\xi_{\mathbf{k}_{cr.}} = \xi_{\mathbf{k}_{cr.}+\mathbf{Q}}$. Si le couplage est plutôt avec l'état d'énergie $-\xi_{-\mathbf{k}}$, comme dans la matrice (25) du champ moyen supraconducteur, le gap s'ouvre au point de croisement déterminé par $\xi_{\mathbf{k}_{cr.}} = -\xi_{-\mathbf{k}_{cr.}}$. Les gaps de la théorie de Bloch, de la théorie BCS, et ceux de tous les modèles phénoménologiques présentés dans cette thèse sont obtenus de cette manière; par anti-croisements. Il suffit de coupler $\xi_{\mathbf{k}}$ à une ou plusieurs dispersions auxiliaires pour obtenir un ou plusieurs gaps. Les modèles ne diffèrent que dans la nature et le nombre de ces dispersions auxiliaires.

Que le pseudogap puisse ou ne puisse pas être modélisé avec un anti-croisement doit être mis au clair. Cette section cherche à simplifier la tâche en divisant les gaps issus d'anti-croisements en deux catégories : les gaps de type SC et les gaps de type AF. L'idée est simple : la première catégorie donne un pseudogap s'apparentant à un gap supraconducteur, la

seconde à un gap antiferromagnétique. C'est une dichotomie similaire à celle des théories de paires préformées vis-à-vis des théories d'un mécanisme particule-trou pour le pseudogap. Toutefois, la distinction n'est ici considérée que d'un point de vue mathématique.

Les deux types de gaps serviront surtout à analyser les résultats. Nous commenterons sur l'aptitude ou l'inaptitude des gap de type SC ou de type AF à expliquer certaines observations expérimentales pour le pseudogap. Nous trouverons des points communs aux théories de type AF et obtiendrons certaines prédictions inévitables avec ces dernières.

Le critère choisi ici pour distinguer nos deux catégories, type SC et type AF, est la façon dont le potentiel chimique intervient dans l'équation des points de croisement, tel que décrit dans ce qui suit.

Type SC Un seul gap étudié dans cette thèse sera interprété comme un pseudogap de type SC : celui du champ moyen supraconducteur (section 8.2). Interpréter ce gap comme un pseudogap correspond à une théorie naïve de paires préformée, c'est-à-dire que le gap supraconducteur persiste au dessus de T_c et que ce sont des fluctuations de phase qui détruisent l'ordre à longue portée. Un exemple plus sophistiqué de pseudogap de type SC, qui n'est pas étudié ici, est la théorie SU(2) [82, 113]. Le point commun à ces théories est que l'équation du croisement peut se réécrire comme l'équation de la surface de Fermi :

$$\xi_{\mathbf{k}_{cr.}} = -\xi_{-\mathbf{k}_{cr.}} \quad (33)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}_{cr.}} - \mu = -\epsilon_{\mathbf{k}_{cr.}} + \mu \quad (34)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}_{cr.}} = \mu \quad (35)$$

à condition que $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{-\mathbf{k}}$. Le gap apparaît alors exactement à la surface de Fermi, et c'est un gap à symétrie particule-trou.

Type AF Trois modèles étudiés dans cette thèse seront interprétés comme des pseudogaps de type AF, c'est-à-dire :

- le champ moyen antiferromagnétique (section 8.1),
- les modèles AF et sAF (sections 14.1 et 14.2),
- la théorie YRZ (section 14.4).

Un autre exemple, qui n'est pas étudié ici, est la version U(1) de la théorie FL* [156]. Le point commun à ces théories s'illustre bien avec le champ moyen antiferromagnétique. Dans ce

dernier, le potentiel chimique se simplifie de l'équation du croisement :

$$\xi_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}} = \xi_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}+\mathbf{Q}}, \quad (36)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}} - \mu = \epsilon_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}+\mathbf{Q}} - \mu, \quad (37)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}} = \epsilon_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}+\mathbf{Q}}, \quad (38)$$

de sorte que le gap a une position fixe relative à la bande, qui est la même pour tout μ . Cela fait que le gap n'est pas contraint à demeurer au niveau de Fermi et il n'a pas la symétrie particule-trou, comme montré en détail dans les résultats de la section 11.2.

La théorie YRZ (présentée à la section 14.4) procure un exemple charnière à notre dichotomie, car sa dispersion auxiliaire $\xi_{\mathbf{k}}^d$ ne contient pas le potentiel chimique. L'analyse du point de croisement donne donc plutôt :

$$\xi_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}} = \xi_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}}^d \quad (39)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}} - \mu = \epsilon_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}}^d \quad (40)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}} - \epsilon_{\mathbf{k}_{\text{cr.}}}^d = \mu \quad (41)$$

Cette équation ne fixe pas la position du gap relativement à la bande, mais comme elle ne contraint pas non plus le gap au niveau de Fermi, on classe la théorie YRZ comme une théorie de type AF.

Nous verrons dans le chapitre qui suit que les autres modèles considérés (d FF-DW, s' PDW, et l'onde de densité de spin incommensurable colinéaire) ne donnent pas de gap au niveau de Fermi pour des paramètres phénoménologiques raisonnables, et ne devraient donc pas être interprétés comme des théories du pseudogap.

Notons finalement qu'il ne s'agit pas seulement de séparer les théories de condensation de paires particule-particule $\langle c^\dagger c^\dagger \rangle$ des théories de condensation particule-trou $\langle c^\dagger c \rangle$. On laisse aussi la possibilité à l'état auxiliaire de ne pas être un électron ou un trou, comme par exemple pour la théorie YRZ, ou dans les théories de bosons esclaves où la condensation serait avec une particule auxiliaire $\langle c^\dagger d \rangle$ (détails à la section 14). La seule distinction qui nous intéresse entre les deux catégories est la façon dont le potentiel chimique intervient dans l'équation des points de croisement.

CHAPITRE III

ONDES DE DENSITÉ

Ce chapitre s'intéresse à la façon dont les ondes de densité mènent à des gaps ou modifient des gaps existants dans la densité d'états. On y présente d'abord les définitions des modèles utilisés : un modèle d'onde de densité à une dimension et les champs moyens des ordres d FF-DW et s 'PDW observés par STM dans les cuprates. En analysant les gaps obtenus dans la densité d'états pour ces modèles, on conclut que le pseudogap ne peut pas provenir des ondes de densité correspondantes. On étudie ensuite comment ces dernières modifient un gap supraconducteur de type d et on montre que les prédictions sont en accord avec les sous-structures du gap observées dans les coeurs de vortex et à champ nul dans les échantillons sous-dopés.

10 Champs moyens d'ondes de densité

10.1 Hamiltonien général

Tous les champs moyens considérés dans ce chapitre sont des cas particuliers du hamiltonien :

$$H = \sum_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}} H_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}}^{\text{sauts}} + \sum_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}} H_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}}^{\text{paires}} + \text{c.h.} \quad (42)$$

Il s'agit de l'expression générale pour exprimer des sauts ou des appariements singulets aux voisins \mathbf{a} pouvant être modulés selon les vecteurs d'onde \mathbf{Q} . Les termes de sauts et leur transformées de Fourier sont donnés par :

$$H_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}}^{\text{sauts}} \equiv e^{i\phi_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}}} \sum_{\mathbf{r}, \sigma} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}, \sigma} e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r} + \frac{\mathbf{a}}{2})} c_{\mathbf{r} + \mathbf{a}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}, \sigma} \quad (43)$$

$$= e^{i\phi_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}, \sigma} e^{-i(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2}) \cdot \mathbf{a}} c_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (44)$$

et les termes d'appariement singulet avec leurs transformées de Fourier par :

$$H_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\text{paires}} \equiv e^{i\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}} \sum_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r} + \frac{\mathbf{a}}{2})} (c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\uparrow} c_{\mathbf{r},\downarrow} - c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\downarrow} c_{\mathbf{r},\uparrow}) \quad (45)$$

$$= e^{i\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} \cos\left(\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2}\right) \cdot \mathbf{a}\right) c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow}. \quad (46)$$

Les différents ordres, comme l'ordre d FF-DW et l'ordre s' PDW, sont définis en fixant les valeurs des champs moyens $t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}$ et $\Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}$ et les phases $\phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}$ et $\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}$. En particulier, les phases permettent de déplacer les noeuds de l'onde de densité (voir annexe A.3.1), bien qu'on ne considère ici que les ordres à phases nulles ; $\phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} = \theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} = 0$.

L'exemple le plus simple est l'hamiltonien H_0 de l'équation (12). Il s'agit d'un cas particulier du hamiltonien (42) ne contenant que les termes de saut à $\mathbf{Q} = 0$, c'est-à-dire $t_{0,0} = -\frac{\mu}{2}$ pour le potentiel chimique, $t_{0,\pm\hat{x},\sigma} = t_{0,\pm\hat{y},\sigma} = -t$ pour les sauts aux premiers voisins, $t_{0,\pm(\hat{x}+\hat{y}),\sigma} = t_{0,\pm(\hat{x}-\hat{y}),\sigma} = -t'$ pour les seconds et ainsi de suite. Pour retrouver l'équation (12), remarquons que le conjugué hermitien de l'équation (42) compense le facteur $\frac{1}{2}$ des équations (A.97) et (A.98).

Tous les autres modèles de champs moyens sont construits à partir de H_0 :

$$H = H_0 + H^{\text{c.m.}}. \quad (47)$$

Par exemple, l'hamiltonien antiferromagnétique, H^{AF} , des équations (16) à (19) est aussi un cas particulier du hamiltonien (42). On l'obtient en choisissant $t_{(\pi,\pi),0,\sigma} = \sigma M$, c'est-à-dire en changeant le signe du champ moyen selon le spin. De même, les hamiltoniens supraconducteurs, H^{sSC} et H^{dSC} , des équations (21) à (25) sont des cas particuliers du hamiltonien (42), obtenus avec $\Delta_{0,0} = \Delta_s$ pour le cas de type s et $\Delta_{0,\hat{x}} = -\Delta_{0,\hat{y}} \equiv \Delta/2$ pour le cas de type d .

10.2 Onde de densité à $Q = \frac{2\pi}{3}$ en une dimension

En une dimension, H_0 n'inclut que $t_{0,0,\sigma} = -\frac{\mu}{2}$ pour le potentiel chimique, $t_{0,\pm\hat{x},\sigma} = -t$ pour les premiers voisins, $t_{0,\pm 2\hat{x},\sigma} = -t'$ pour les seconds voisins, menant donc à la dispersion suivante :

$$\xi_k^{\text{1D}} = -2t \cos(k) - 2t' \cos(2k) - \mu. \quad (48)$$

Une onde de densité très simple est obtenue en posant $Q = \frac{2\pi}{3}$, avec $t_{Q,0} = 2t_Q$ seulement :

$$H^{\text{ID}} = \sum_{k,\sigma} \left(\xi_k^{\text{ID}} c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + t_Q c_{k+Q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + t_Q^* c_{k,\sigma}^\dagger c_{k+Q,\sigma} \right). \quad (49)$$

La zone de Brillouin originale couvre $-\pi < k \leq \pi$. En restreignant plutôt k à une zone de Brillouin réduite (rBZ), c'est-à-dire $-\frac{Q}{2} < k < \frac{Q}{2}$, l'hamiltonien s'écrit sous forme matricielle (démarche complète à l'Annexe A.3.2, incluant aussi des termes d'appariements) :

$$= \sum_{k \in \text{rBZ}, \sigma} \begin{pmatrix} c_{k,\sigma}^\dagger & c_{k+Q,\sigma}^\dagger & c_{k+2Q,\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k & t_Q^* & t_Q \\ t_Q & \xi_{k+Q} & t_Q^* \\ t_Q^* & t_Q & \xi_{k+2Q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k,\sigma} \\ c_{k+Q,\sigma} \\ c_{k+2Q,\sigma} \end{pmatrix} \quad (50)$$

Soulignons la ressemblance entre cette matrice 3×3 et la matrice infinie (5) de la théorie de Bloch. Leur comparaison sera le point de départ pour les résultats de la section 11.1.

10.3 dFF-DW

Comme présenté à la section 3.1, l'ordre de densité de charge observé dans les cuprates est l'ordre dFF-DW [72]. Bien que la nature de l'ordre semble unidirectionnelle [75, 73], les ondes de densité dans les deux directions coexistent pour donner l'ordre en damier (*checkerboard*) observé depuis 2002, en particulier dans les vortex [69].

Nous considérons donc ici le cas bidirectionnel. C'est un cas particulier du hamiltonien (42) constitué de deux ondes de densité perpendiculaires avec $t_{Q,\pm\hat{x}} = -t_{Q,\pm\hat{y}} \equiv t_Q/2$ pour les vecteurs d'ondes $\mathbf{Q} \in \{(Q, 0), (0, Q)\}$ avec Q prenant les valeurs entre $Q = \frac{2\pi}{4}$ et $Q = \frac{2\pi}{3}$ mentionnées à la section 3. Ce modèle fut d'ailleurs utilisé pour obtenir un accord quantitatif avec les oscillations quantiques [121]. Les termes à $-\mathbf{Q}$ sont inclus via le conjugué hermitien. Après quelques manipulations, et toujours avec $a = 1$, l'hamiltonien s'exprime comme :

$$H_Q^{\text{dFF-DW}} = \sum_{\mathbf{r},\sigma} \frac{t_Q}{2} \left(\left(\cos(Q(x + \frac{1}{2})) + \cos(Qy) \right) c_{\mathbf{r}+\hat{x},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r},\sigma} - \left(\cos(Qx) + \cos(Q(y + \frac{1}{2})) \right) c_{\mathbf{r}+\hat{y},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r},\sigma} \right) + \text{c.h} \quad (51)$$

$$= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{t_Q}{2} \left(\left(\cos(k_x + \frac{Q}{2}) - \cos(k_y) \right) c_{\mathbf{k}+Q\hat{x},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \left(\cos(k_x) - \cos(k_y + \frac{Q}{2}) \right) c_{\mathbf{k}+Q\hat{y},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \right) + \text{c.h} \quad (52)$$

L'onde de densité de charge des équations (51) et (52) module l'amplitude des sauts aux

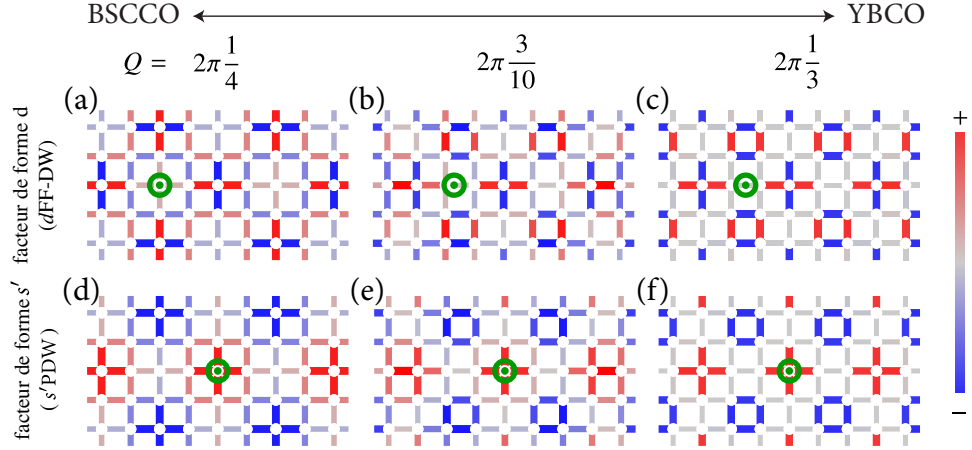


Figure 13. Facteurs de forme des ordres $d\text{FF-DW}$ et $s'\text{PDW}$. (a), (b), (c) La modulation par l'ordre $d\text{FF-DW}$ est de signes opposés sur les liens en x et en y . (d), (e), (f) Celle de l'ordre $s'\text{PDW}$ est de même signe dans les deux directions. Les vecteurs d'onde présentés sont (a), (d) $Q = \frac{2\pi}{4}$, (b), (e) $\frac{3}{10}2\pi$, et (c), (f) $\frac{2\pi}{3}$. Pour un dopage de $p = 0.12$, le premier correspond à celui mesuré dans BSCCO alors que les deux autres sont plus près de YBCO [65]. Les liens colorés sur les réseaux illustrent la valeur du facteur de forme (la fonction construite des $e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{a}}{2})}$) modulant le saut au premier voisin dans l'équation (52) pour l'ordre $d\text{FF-DW}$, et l'appariement au premier voisin dans l'équation (54) pour l'ordre $s'\text{PDW}$. Le cercle vert est le centre de rotation de symétrie C_4 du facteur de forme. On peut voir que ce dernier n'est pas toujours superposé au réseau; l'ordre $d\text{FF-DW}$ brise la symétrie C_4 en (b) et en (c). Pour les autres panneaux, elle est préservée.

premiers voisins, on la nomme donc parfois «onde de densité de lien» (*bond density waves*), qui est implicite dans l'appellation «facteur de forme d ».

Les figures 13(a) à 13(c) montrent le patron formé pour l'amplitude de chaque saut dans l'ordre $d\text{FF-DW}$ pour $Q = \frac{2\pi}{4}, \frac{3}{10}2\pi, \frac{2\pi}{3}$. Selon le vecteur d'onde, le centre de rotation de symétrie C_4 de ces patrons n'est pas toujours superposé à celui du réseau. Cela fait que l'ordre $d\text{FF-DW}$ brise parfois la symétrie C_4 .

10.4 $s'\text{PDW}$

L'ordre de densité de paires observé par JSTM dans les cuprates est l'ordre $s'\text{PDW}$ [96]. C'est un cas particulier du hamiltonien (42) avec $\Delta_{\mathbf{Q},\pm\hat{x}} = \Delta_{\mathbf{Q},\pm\hat{y}} \equiv \Delta_Q/2$ pour les quatre vecteurs d'ondes $\mathbf{Q} \in \{(Q, 0), (-Q, 0), (0, Q), (0, -Q)\}$. Les \mathbf{Q} opposés correspondent à

des paires de quantités de mouvement opposées. L'hamiltonien est :

$$H_Q^{s'PDW} = \sum_{\mathbf{r}} \Delta_Q \left(\left(\cos(Q(x + \frac{1}{2})) + \cos(Qy) \right) (c_{\mathbf{r}+\hat{x},\uparrow} c_{\mathbf{r},\downarrow} - c_{\mathbf{r}+\hat{x},\downarrow} c_{\mathbf{r},\uparrow}) \right. \\ \left. + \left(\cos(Qx) + \cos(Q(y + \frac{1}{2})) \right) (c_{\mathbf{r}+\hat{y},\uparrow} c_{\mathbf{r},\downarrow} - c_{\mathbf{r}+\hat{y},\downarrow} c_{\mathbf{r},\uparrow}) \right) + \text{c.h.} \quad (53)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \Delta_Q \left(\left(\cos(k_x + \frac{Q}{2}) + \cos(k_y) \right) c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-(\mathbf{k}+Q\hat{x}),\downarrow} \right. \\ + \left(\cos(k_x - \frac{Q}{2}) + \cos(k_y) \right) c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-(\mathbf{k}-Q\hat{x}),\downarrow} \\ + \left(\cos(k_x) + \cos(k_y + \frac{Q}{2}) \right) c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-(\mathbf{k}+Q\hat{y}),\downarrow} \\ \left. + \left(\cos(k_x) + \cos(k_y - \frac{Q}{2}) \right) c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-(\mathbf{k}-Q\hat{y}),\downarrow} \right) + \text{c.h.} \quad (54)$$

Ces ondes sont des modulations de l'appariement aux premiers voisins. Les figures 13(d) à 13(f) montrent les patrons formés par l'ordre s' PDW pour $Q = \frac{2\pi}{4}, \frac{3}{10}2\pi, \frac{2\pi}{3}$. Le signe de Δ_Q est le même en x et en y , ce qui traduit la symétrie s -étendue. Le patron diffère donc de celui de l'ordre d FF-DW. La symétrie C_4 est toujours préservée dans ce cas-ci.

10.5 Représentation matricielle du hamiltonien général

Il est possible d'écrire la représentation matricielle du hamiltonien (42) pour n'importe quelle combinaison d'ondes de densité. Les sections précédentes présentaient les représentations matricielles de la théorie de Bloch (équation 5), du champ moyen antiferromagnétique (équation 19), du champ moyen supraconducteur (équation 25) et du champ moyen d'onde de densité en une dimension avec $Q = \frac{2\pi}{3}$ (équation 50). Cette section et l'annexe A.3.3 généralise la démarche au cas du hamiltonien (42), permettant de produire les matrices pour l'ordre d FF-DW et l'ordre s' PDW, seuls ou combinés, avec ou sans supraconductivité, et pour toutes les combinaisons de vecteurs d'onde.

La taille de la matrice dépend de tous les vecteurs d'onde inclus dans l'hamiltonien (42). Ceux-ci déterminent une nouvelle périodicité au système. En une dimension, on cherche la période L correspondant au plus petit commun multiple (PPCM) des périodes de chaque onde de densité. En deux dimensions, on cherche plutôt un nouveau réseau avec la plus petite maille élémentaire commune. On ne cherchera pas ici à trouver systématiquement cette dernière. Comme les vecteurs d'onde des ordres d FF-DW et s' PDW sont orientés selon x et y , on ne travaille qu'avec des super-réseaux rectangulaires. Il suffit donc de prendre les PPCM L_x et L_y des composantes en x et en y de tous les vecteurs \mathbf{Q} du hamiltonien. Le nombre de sites du réseau dans la maille élémentaire est alors $L = L_x L_y$. Procéder ainsi

pour un vecteur d'onde diagonal, par exemple $\mathbf{Q} = (\pi \pm \delta, \pi)$ pour l'onde de densité de spin incommensurable (section 17.2), donne toutefois une nouvelle maille élémentaire surdimensionnée. Cela ne cause pas de problème majeur; les valeurs propres obtenues sont simplement dégénérées et les calculs ne sont pas optimisés.

La méthode choisie pour déterminer la nouvelle maille élémentaire n'a pas d'importance. L'important est qu'elle détermine un super-réseau qui vient avec un super-réseau réciproque, constitué des vecteurs \mathbf{K} (l'annexe A.2 donne plus de détails sur les super-réseaux). La zone de Brillouin originale contient un total de L vecteurs \mathbf{K} , c'est-à-dire autant qu'il y a de sites du réseau dans la nouvelle maille élémentaire. Comme pour l'antiferromagnétisme, on peut donc restreindre la somme sur \mathbf{k} à une zone de Brillouin réduite correspondant à la maille de Wigner-Seitz du super-réseau réciproque,

$$\sum_{\mathbf{k}} (\cdots)_{\mathbf{k}} = \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{K}} (\cdots)_{\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}}. \quad (55)$$

où la notation $\tilde{\mathbf{k}}$ indiquent que les vecteurs sont restreints à la zone de Brillouin réduite, et les \mathbf{K} sont restreints à la zone de Brillouin originale. La périodicité de la zone de Brillouin originale permet de toujours replier les vecteurs $\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K} + \mathbf{Q}$ à un $\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}'$ dans la zone de Brillouin originale, assurant une taille finie à la matrice. Comme il y a L vecteurs \mathbf{K} dans la zone de Brillouin originale, la matrice sera $L \times L$. Ajouter les termes d'appariements via le formalisme de Nambu requiert ensuite de doubler cette taille. La dimension finale de la matrice sera donc de $2L \times 2L$. Par exemple, pour l'ordre $d\text{FF-DW}$ avec $Q = \frac{3}{10}2\pi$ en coexistence avec la supraconductivité, on a $L_x = 10$ et $L_y = 10$, et le facteur 2 pour la représentation de Nambu, donc la matrice est de taille 200×200 . Les milliers de termes d'une telle matrice s'écrivent toutefois sous une forme analytique compacte.

En exploitant toutes les idées mentionnées dans cette section, l'annexe A.3.3 montre comment passer du hamiltonien (42) à la forme matricielle suivante (qui mène bien à un hamiltonien hermitien grâce à l'addition explicite du conjugué) :

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \begin{pmatrix} c_{\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}, \uparrow}^\dagger & c_{-(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}), \downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [\hat{t}_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}, \uparrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} & 0 \\ [\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} & [\hat{t}_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}, \downarrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}', \uparrow} \\ c_{-(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}'), \downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \text{c.h.} \quad (56)$$

Les deux dimensions de Nambu sont écrites explicitement, et les $\hat{t}_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}, \sigma}(\tilde{\mathbf{k}})$ et $\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}}(\tilde{\mathbf{k}})$ sont les matrices $L \times L$ couplant les électrons de Bloch en $\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$ avec ceux en $\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}'$. Ces éléments

sont donnés par :

$$[\hat{t}_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} = \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow} \exp [i (-(\mathbf{k} + \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a} + \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} - \mathbf{K}' \cdot \mathbf{a})] \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{K}-\mathbf{K}',\mathbf{Q}+\mathbf{G}} \quad (57)$$

$$[\hat{t}_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\downarrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} = -\frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\downarrow} \exp [i ((\mathbf{k} - \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a} + \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{a})] \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{K}-\mathbf{K}',\mathbf{Q}+\mathbf{G}} \quad (58)$$

$$[\hat{\Delta}_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} = -\frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} e^{i\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}} \cos ((\mathbf{k} + \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a} + \mathbf{K}' \cdot \mathbf{a}) \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{K}-\mathbf{K}',\mathbf{Q}+\mathbf{G}} \quad (59)$$

où les \mathbf{G} sont les vecteurs du réseau réciproque original.

10.6 Densité d'états et poids spectral

La densité d'états $N(\epsilon)$ ou $N(\omega)$ (avec $\epsilon = \hbar\omega$) décrit la distribution des états électroniques en fonction de l'énergie. Lorsqu'intégrée, elle doit donner le nombre d'états total. On la normalise ici à 2; le nombre d'états par maille élémentaire :

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon N(\epsilon) = 2. \quad (60)$$

La densité d'états compte donc une contribution à chaque fois que ϵ correspond à l'énergie d'un état propre du système. Mathématiquement, cela s'exprime comme :

$$N(\epsilon) \equiv \frac{1}{N} \sum_{n\mathbf{k}} \delta(\epsilon - E_{n\mathbf{k}}) \quad (61)$$

où la somme sur n inclut les spins et le facteur $\frac{1}{N}$ assure la normalisation. Remarquons que la densité d'états peut s'écrire séparément pour chaque bande : $N(\epsilon) = \sum_n N_n(\epsilon)$.

Considérons maintenant un état quelconque $|\alpha_{\mathbf{k}}\rangle$ en superposition de plusieurs n , mais bien défini en \mathbf{k} . Puisqu'il n'est pas un état propre, l'état $|\alpha_{\mathbf{k}}\rangle$ est distribué en énergie. Cela se voit en pondérant la densité d'états du système par la probabilité d'y trouver l'état α :

$$N_{\alpha}(\epsilon) = \frac{1}{N} \sum_{n\mathbf{k}} |\langle \alpha_{\mathbf{k}} | n \rangle|^2 \delta(\epsilon - E_{n\mathbf{k}}). \quad (62)$$

Dans le cas sans interaction, le poids spectral est simplement la version résolue en \mathbf{k} de cette densité d'états pondérée, c'est-à-dire :

$$A_{\alpha,\mathbf{k}}(\epsilon) \equiv \sum_n |\langle \alpha_{\mathbf{k}} | n \rangle|^2 \delta(\epsilon - E_{n\mathbf{k}}). \quad (63)$$

En considérant le recouvrement d'états α et β différents on obtient la forme matricielle :

$$[\hat{A}_{\mathbf{k}}(\epsilon)]_{\alpha,\beta} \equiv \sum_n \langle \alpha_{\mathbf{k}} | n \rangle \langle n | \beta_{\mathbf{k}} \rangle \delta(\epsilon - E_{n\mathbf{k}}). \quad (64)$$

Les expressions (61) et (64) se prêtent mal à l'implémentation numérique. La voie préférable pour exprimer le poids spectral est donc d'utiliser la fonction de Green. On n'a ici besoin que de la fonction de Green sans interaction, que l'on utilise dans la forme :

$$\hat{G}_{\mathbf{k}}(\omega) = [\epsilon - i\eta - \hat{H}_{\mathbf{k}}]^{-1}, \quad (65)$$

où $\epsilon = \hbar\omega$ est l'énergie, $\eta \rightarrow 0$ assure la causalité, et $\hat{H}_{\mathbf{k}}$ est la représentation matricielle du hamiltonien. Le poids spectral est alors obtenu comme :

$$\hat{A}_{\mathbf{k}}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ \hat{G}_{\mathbf{k}}(\omega) \}. \quad (66)$$

Il ne faut donc qu'une inversion de matrice pour calculer le poids spectral une fois l'hamiltonien sous la forme matricielle (56). La limite $\eta \rightarrow 0$, inaccessible numériquement, est approchée par une valeur entre $0.05t$ et $0.005t$. Notons aussi que dans les calculs de transport, η devient le taux de diffusion (section 15.4).

11 Ondes de densité et pseudogap

11.1 Onde de densité en une dimension

La figure 14 montre les gaps ouverts par une onde de densité dans une bande en une dimension. Le résultat est parfaitement analogue aux gaps ouverts par le potentiel cristallin dans la théorie de Bloch.

En général, un gap causé par une onde de densité ne se retrouve pas au niveau de Fermi. Comme les gaps de la théorie de Bloch, les gaps de l'onde de densité correspondent à l'anticroisement de la dispersion de l'électron en \mathbf{k} avec la dispersion de l'électron diffusé en $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ par le potentiel périodique. Les gaps s'ouvrent donc à un vecteur d'onde bien précis, comme on peut le voir à la figure 14(d). Le gap ne s'ouvrira au niveau de Fermi que si le vecteur d'onde \mathbf{Q} s'emboîte (au sens de *nesting*) dans la surface de Fermi. En une dimension, l'emboîtement correspond simplement au cas où le vecteur \mathbf{Q} a exactement la longueur séparant les deux points constituant la surface de Fermi.

Comme les gaps d'une onde de densité sont contraints en \mathbf{k} et que, par définition,

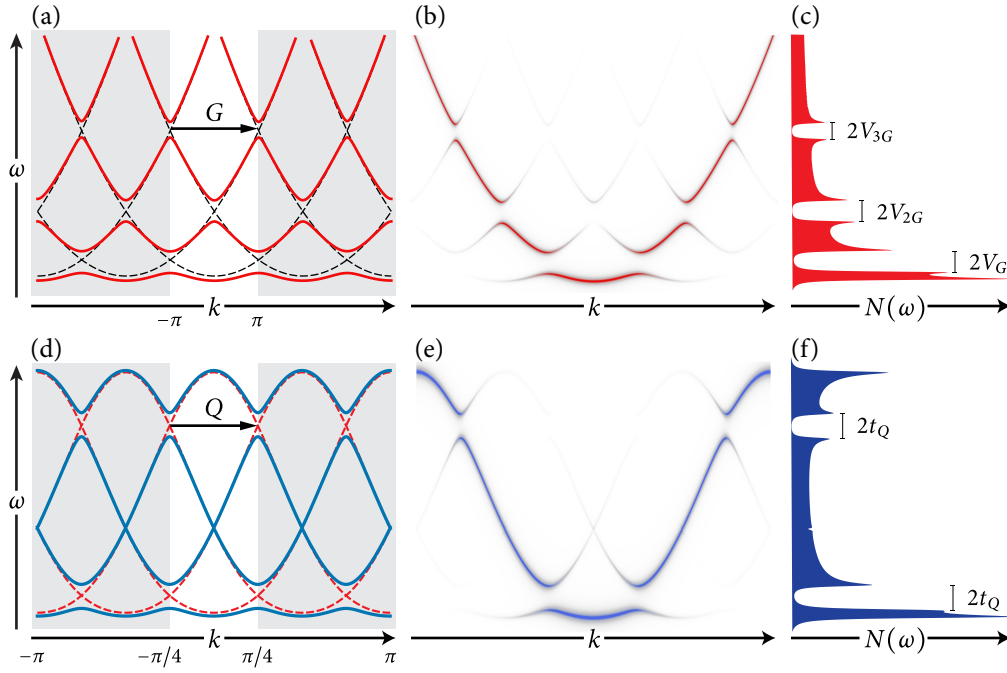


Figure 14. Gaps d'onde de densité en une dimension (a) Gaps ouverts dans la dispersion d'électrons libres par le potentiel périodique cristallin de la théorie de Bloch. (b) Poids spectral pour la théorie de Bloch; montre le recouvrement des états de Bloch avec ceux de l'électron libre. (c) Densité d'états dans la théorie de Bloch; chaque gap provient d'une composante de Fourier différente du potentiel cristallin. (d) Énergies propres pour une bande de Bloch isolée, reconstruite par le potentiel périodique d'une onde de densité avec vecteur d'onde $Q = \frac{2\pi}{4}$. (e) Poids spectral pour la reconstruction par onde de densité; montre le recouvrement des nouveaux états propres avec ceux de la bande de Bloch initiale. (f) Densité d'états pour la reconstruction par onde de densité; la périodicité de la bande de Bloch initiale fait que la même composante de Fourier du potentiel d'onde de densité ouvre deux gaps. Les modèles utilisés sont ceux des sections 6.1 et 10.2

les états électroniques sont distribués uniformément en \mathbf{k} , ces gaps ne se retrouvent au niveau de Fermi qu'à des valeurs précises du remplissage. C'est ce qu'on entend par «gaps à remplissages fixes». Autrement dit, la position des gaps relative au reste de la bande est indépendante du potentiel chimique.

Il existe toutefois une différence notable entre les gaps d'onde de densité et les gaps de la théorie de Bloch. Dans la théorie de Bloch, au premier ordre, chaque composante de Fourier V_G du potentiel périodique n'ouvre qu'un gap. En effet, deux paraboles, en l'occurrence $\frac{k^2}{2m}$ et $\frac{(k+G)^2}{2m}$, n'ont qu'un seul point de croisement en une dimension. Chaque gap illustré à la figure 14(c) vient donc d'un terme différent du potentiel. Cependant, dans l'onde de densité, les gaps s'ouvrent dans une bande de Bloch, qui est une dispersion périodique. Les deux fonctions $\xi_{\mathbf{k}}$ et $\xi_{\mathbf{k}+Q}$ ont donc au moins deux points de croisement : un associé à

leurs minima, et l'autre associé à leurs maxima, car les deux sont approximativement des paraboles. Une même composante du potentiel peut donc ouvrir plus d'un gap.

11.2 Gaps du champ moyen antiferromagnétique

Le champ moyen antiferromagnétique à $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ illustre bien les subtilités du passage à deux dimensions. Le gap antiferromagnétique s'ouvre aux points de croisement des dispersions $\xi(\mathbf{k})$ et $\xi(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$. Ces points forment la frontière de la zone de Brillouin antiferromagnétique. Cette dernière correspond au losange blanc visible aux figures 15(a), 15(d) et 15(g). Comme en une dimension, le gap est fixé à des valeurs de \mathbf{k} ; celles qui sont sur cette frontière.

La zone de Brillouin antiferromagnétique sépare l'espace des \mathbf{k} en deux volumes égaux. La dispersion originale $\xi_{\mathbf{k}}$, illustrée à la figure 15(b), se sépare donc en deux bandes $E_{\mathbf{k}}^-$ et $E_{\mathbf{k}}^+$, illustrées aux figures 15(e) et (h) pour deux valeurs de M . Chacune contient une moitié des états \mathbf{k} , de sorte que lorsque le gap est total, il se retrouve exactement au demi-remplissage (figure 15(i)).

Les figures 15(d), 15(e) et 15(f) montrent que, pour des valeurs intermédiaires du champ moyen M , les bandes peuvent se chevaucher en énergie sans se toucher dans l'espace des \mathbf{k} . Une telle situation est caractérisée par la présence à la fois de pochettes de trous et de pochettes d'électrons à la surface de Fermi au demi-remplissage; le système est donc métallique. Pour les valeurs de M suffisamment petites, cette coexistence de pochettes de trous et d'électrons persiste à dopage fini, comme illustré pour $p = 0.2$ à la figure 15(d). Pour les plus grandes valeurs de M , lorsque le gap est complet, les pochettes de trous se retrouvent sous le gap et les pochettes d'électrons au-dessus. Cette coexistence est alors impossible et le système devient isolant à demi remplissage.

Lorsque les bandes se chevauchent, on retrouve des gaps partiels dans la densité d'états.¹ À la figure 15(f), deux gaps incomplets apparaissent de chaque côté du demi-remplissage dans la densité d'états totale (violet). Chacun de ces gaps correspond à la chute de densité d'états associée à l'extrémité d'une des deux bandes. On le voit en séparant la contribution de chaque bande à la densité d'états (en rouge et en bleu). Plus M est grand, moins le domaine de chevauchement est grand, et plus ces gaps se rapprochent du demi-remplissage.

1. Plus spécifiquement, la distinction entre la notion d'un gap «complet» ou «total» et celle d'un gap «partiel» ou «incomplet» est la suivante. Le gap à l'énergie ω est complet ou total si aucun état ne se retrouve à cette énergie. L'élargissement η peut faire en sorte que la densité d'états soit non nulle dans un gap total, mais cet élargissement est artificiel. En contrepartie, le gap est partiel ou incomplet lorsqu'une chute de la densité d'états est observée, mais que des états demeurent à l'énergie ω .

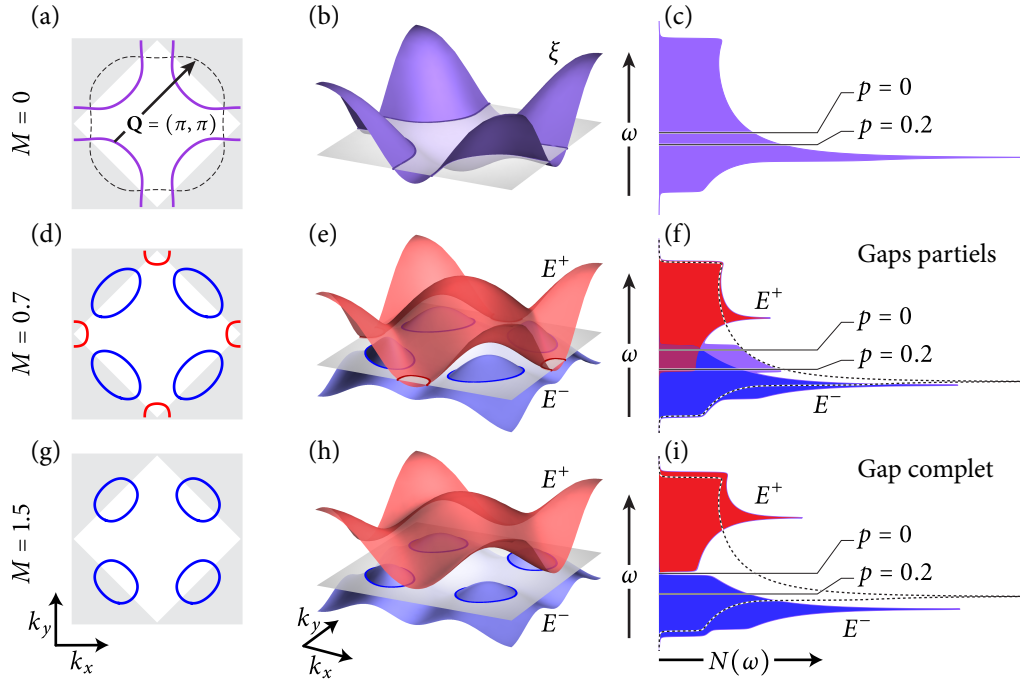


Figure 15. Gaps en champ moyen antiferromagnétique (a) Surface de Fermi $\xi_{\mathbf{k}} = 0$ à $p = 0.2$ pour la bande de Bloch aux paramètres $(t', t'') = (-0.3, 0.2)$. Le losange blanc dénote la zone de Brillouin réduite antiferromagnétique et la ligne pointillée dénote la surface de Fermi $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = 0$ des électrons diffusés par le potentiel antiferromagnétique à $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. (b) Dispersion $\xi_{\mathbf{k}}$ traversée par le niveau de Fermi à $p = 0.2$. (c) Densité d'états pour $\xi_{\mathbf{k}}$ avec les positions du niveau de Fermi pour $p = 0$ et $p = 0.2$. (d) surface de Fermi pour les énergies propres $E^- = 0$ en bleu et $E^+ = 0$ en rouge, pour $p = 0.2$ en champ moyen antiferromagnétique d'amplitude $M = 0.7$. (e) Bandes antiferromagnétiques E^- en bleu et E^+ en rouge à $M = 0.7$, traversées par le niveau de Fermi à $p = 0.2$. (f) Densité d'états à $M = 0.7$ pour les bandes E^- en bleu, E^+ en rouge, leur somme en violet et celle à $M = 0$ en pointillée pour comparer. La gamme d'énergie où les deux bandes sont superposées conserve la même densité d'états que pour $M = 0$. Les gaps apparaissent de part et d'autre de cette gamme d'énergie. Les positions du niveau de Fermi pour $p = 0$ et $p = 0.2$ sont aussi indiquées. (g), (h) et (i) mêmes que (d), (e) et (f), mais pour $M = 1.5$. Un gap complet très étroit apparaît alors précisément à $p = 0$.

Il s'y rejoignent enfin pour y former le gap complet, à demi-remplissage. On voit ce dernier, très étroit, à la figure 15(i).

La valeur de M à laquelle le gap antiferromagnétique devient complet dépend fortement des paramètres de bande. Par exemple, pour $(t', t'') = (0, 0)$ on ne trouve jamais de gaps partiels; le gap est toujours complet. En effet, dans ce cas, et dans ce cas seulement, le vecteur $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ s'emboîte parfaitement (au sens de *nesting*) sur toute la surface de Fermi du demi-remplissage.

Les valeurs d'énergies où se trouvent les gaps partiels dépendent aussi des paramètres de bande. À faible M , lorsque ces gaps sont très petits, ils se retrouvent à l'énergie E_g à laquelle le vecteur $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ s'emboîte parfaitement (au sens de *nesting*) dans une portion du contour équiénergie $\xi(\mathbf{k}) = E_g$. L'énergie respectant cette condition dépend de la forme de la dispersion, et donc des paramètres de bande. Le remplissage correspondant, lui, dépend à la fois des paramètres de bande et du champ moyen M . En effet, tant que les deux bandes se chevauchent, les gaps ne se trouvent pas à demi-remplissage, alors que pour M suffisamment grand, ils s'y rejoignent. Les gaps bougent donc en énergie et en remplissage avec l'augmentation de M , et ce mouvement dépend des paramètres de bande.

De plus, ces gaps deviennent très asymétriques en s'agrandissant et ils n'ont pas de point central évident. Leur position est donc difficile à définir par leur simple forme, conséquence du fait qu'ils correspondent à l'extrémité d'une bande chevauchant une autre bande. Bref, du point de vue de leur forme, ils sont très différents d'un gap supraconducteur.

Enfin, il demeure qu'à champ moyen M fixe, la position et la forme des gaps relative au reste de la bande est indépendante du potentiel chimique; les gaps sont à remplissage fixes.

11.3 Gaps du champ moyen d FF-DW

La section 10.3 présente le modèle champ-moyen d FF-DW proposé pour décrire l'ordre de charge observé dans les cuprates et décrit à la section 3.1. Ce dernier est caractérisé par deux vecteurs d'onde perpendiculaires, $\mathbf{Q}_x = (Q, 0)$ et $\mathbf{Q}_y = (0, Q)$, avec $Q = \frac{2\pi q}{L}$ variant entre $\frac{2\pi}{5}$ et $\frac{2\pi}{3}$ selon le matériau et le dopage considérés. L'ordre d FF-DW a donc une nouvelle cellule périodique L^2 fois plus volumineuse que la maille élémentaire originale. En conséquence, la zone de Brillouin réduite est L^2 fois plus petite que l'originale et la dispersion $\xi_{\mathbf{k}}$ se sépare donc en L^2 nouvelles bandes $E_{m\mathbf{k}}$. Par exemple, avec $\mathbf{Q}_x = (\frac{2\pi}{3}, 0)$ et $\mathbf{Q}_y = (0, \frac{2\pi}{3})$, la maille périodique a 9 sites, ce qui mène donc à 9 nouvelles bandes. On comprend alors que $\mathbf{Q}_x = (\frac{3}{10}2\pi, 0)$ et $\mathbf{Q}_y = (0, \frac{3}{10}2\pi)$ mènent à 100 bandes, et que le cas purement incommensurable, c'est-à-dire Q irrationnel, mène à un nombre infini de bandes.

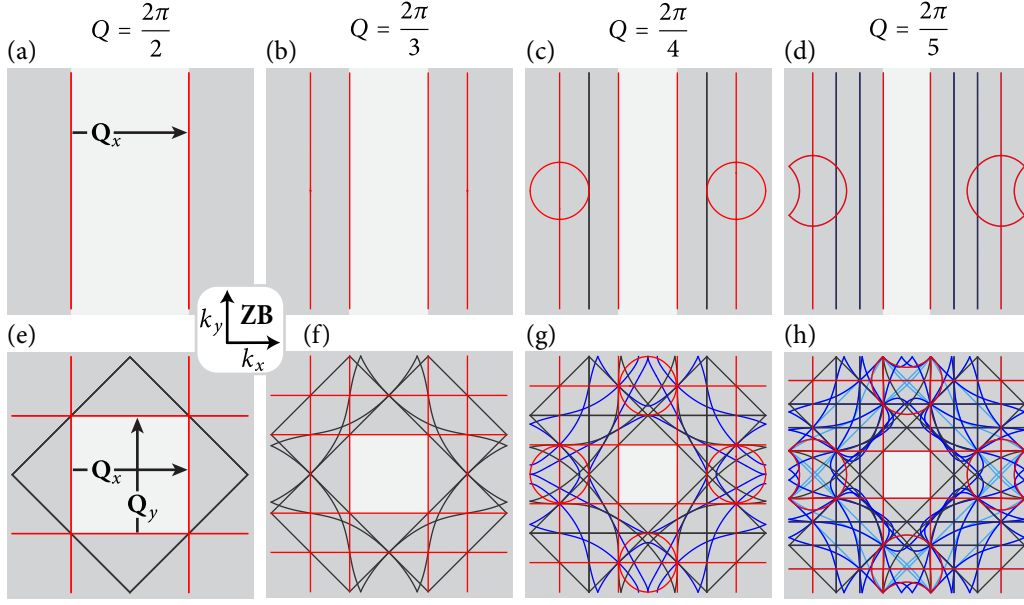


Figure 16. Positions des gaps en deux dimensions dans l'ordre $d\text{FF-DW}$ avec $\mathbf{Q}_x = (Q, 0)$ et $\mathbf{Q}_y = (0, Q)$ pour les paramètres de bande $(t', t'') = (-0.3t, 0.2t)$ dans la zone de Brillouin originale. Les rectangles blancs dénotent la zone de Brillouin réduite. (a-b-c-d) pour \mathbf{Q}_x seulement, (e-f-g-h) pour \mathbf{Q}_x et \mathbf{Q}_y , (a-e) pour $Q = 2\pi/2$, (b-f) pour $Q = 2\pi/3$, (c-g) pour $Q = 2\pi/4$, (d-h) pour $Q = 2\pi/5$. Les couleurs dénotent «l'ordre» des croisements, c'est-à-dire : les points de croisement $\mathbf{k}_{\text{cr.}}$ sont des solutions de $\xi(\mathbf{k}_{\text{cr.}}) = \xi(\mathbf{k}_{\text{cr.}} + n\mathbf{Q}_x + m\mathbf{Q}_y)$, en rouge pour $n + m = 1$, en noir pour $n + m = 2$, en bleu pour $n + m = 3$ et en cyan pour $n + m = 4$.

Autrement dit, plus L est grand, moins \mathbf{k} est un bon nombre quantique (celui de la zone de Brillouin originale). C'est le résultat attendu d'un système qui brise l'invariance sous translation.

À L fini, la position des gaps est fixée en \mathbf{k} . Toutefois, contrairement aux paraboloïdes $\frac{\mathbf{k}^2}{2m}$ et $\frac{(\mathbf{k}+\mathbf{G})^2}{2m}$ de la théorie de Bloch, les fonctions périodiques $\xi(\mathbf{k})$ et $\xi(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ ne se croisent pas qu'aux plans de Bragg du super-réseau. La figure 16 illustre les points de croisement, solutions à l'équation $\xi(\mathbf{k}) = \xi(\mathbf{k} + n\mathbf{Q})$; ce sont les points auxquels s'ouvrent des gaps. La plupart concordent avec les plans de Bragg du super-réseau, car en première approximation, le minimum de $\xi(\mathbf{k})$ en $\mathbf{k} = 0$ est parfaitement analogue à un paraboloïde de la théorie de Bloch. Toutefois, d'autres points de croisement peuvent apparaître, associés aux autres extrema de $\xi(\mathbf{k})$. Les cercles visibles aux figures 16(c) et (d) en sont des exemples; ils sont associés à un minimum local très plat à $(\pm\pi, 0)$, le col étant dédoublé pour les paramètres de bande choisis. Bref, la position exacte des nouveaux points de croisement dépend du vecteur \mathbf{Q} , mais aussi des paramètres de bande; t, t' , etc. Il est possible de tous les retrouver aux plans de Bragg du super-réseau; c'est le cas aux Fig 16(a), 16(b) et 16(e), mais ce n'est

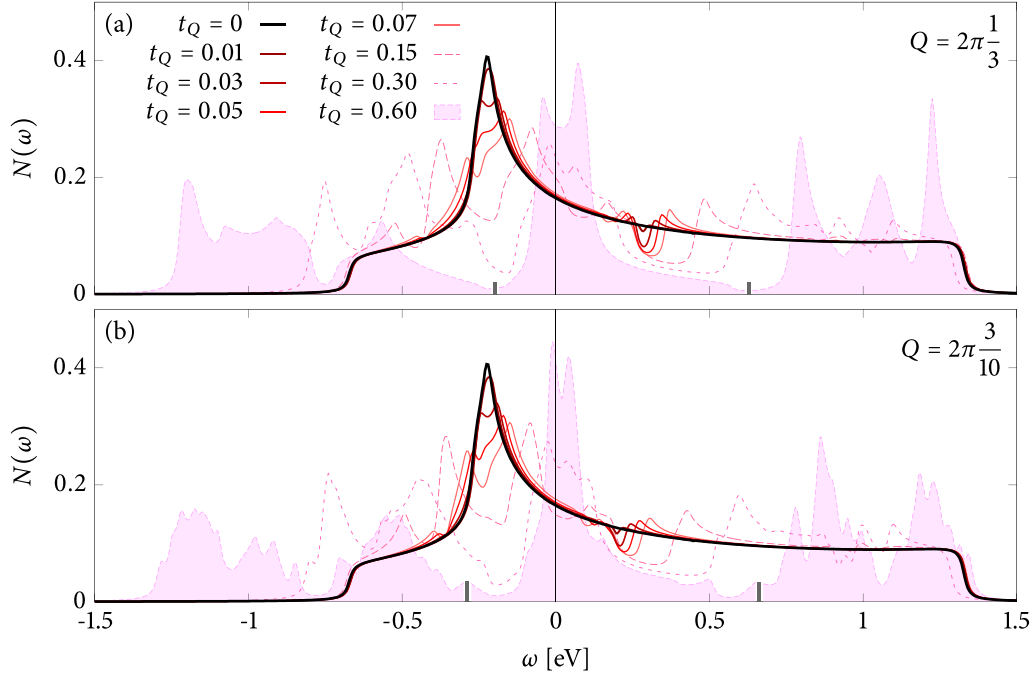


Figure 17. Densité d'états en champ moyen $d\text{FF-DW}$ bidirectionnel. À toutes les valeurs de champ moyen t_Q , les gaps apparaissent loin du niveau de Fermi ($\omega = 0$). Les paramètres de bandes sont $(t't') = (-0.3, 0.2)$, le dopage est fixé à $p = 0.12$ et ω est donné pour $t = 250$ meV. (a) Cas des vecteurs d'onde $\mathbf{Q} = (2\pi\frac{1}{3}, 0)$ et $\mathbf{Q}_y = (0, 2\pi\frac{1}{3})$ qui sépare la dispersion en trois. Les petits rectangles noirs en abscisse dénotent les énergies correspondantes aux remplissages $\frac{1}{3}$ et $\frac{2}{3}$ pour le cas $t_Q = 0.6$. (b) Même chose pour le cas $\mathbf{Q}_x = (2\pi\frac{3}{10}, 0)$ et $\mathbf{Q}_y = (0, 2\pi\frac{3}{10})$, donnant des résultats très similaires qui montrent que l'incommensurabilité a peu d'impact.

pas le cas en général. Quoi qu'il en soit, ces points de croisement demeurent indépendants du potentiel chimique ou de l'amplitude du champ moyen. Bref, les gaps sont fixés en \mathbf{k} .

Malgré la multitude de points de croisements où s'ouvrent des gaps, le système est décrit par une matrice $L^2 \times L^2$ et il est donc contraint à donner seulement L^2 bandes distinctes. De plus, certaines de ces bandes sont équivalentes, car les vecteurs d'onde \mathbf{Q}_x et \mathbf{Q}_y ont des effets symétriques sur la dispersion originale, cette dernière étant invariante sous changement $k_x \leftrightarrow \pm k_y$. La densité d'états ne se séparera donc pas nécessairement en L^2 .

La figure 17 montre deux exemples de densité d'états obtenus en champ moyen $d\text{FF-DW}$. Les vecteurs d'onde $\mathbf{Q} = 2\pi\frac{1}{3}$ et $\mathbf{Q} = 2\pi\frac{3}{10}$ produisent des résultats très similaires, ce qui indique que l'incommensurabilité a peu d'importance. Cela indique que les 100 bandes du cas $\mathbf{Q} = 2\pi\frac{3}{10}$ sont configurées de façon similaire aux 9 bandes du cas $\mathbf{Q} = 2\pi\frac{1}{3}$. À $t_Q = 0.6$, les gaps du cas $\mathbf{Q} = 2\pi\frac{1}{3}$ sont complets et séparent la densité d'états en trois parties distinctes. De petites barres grises marquent les énergies auxquelles le remplissage serait de $\frac{1}{3}$ et $\frac{2}{3}$ si on

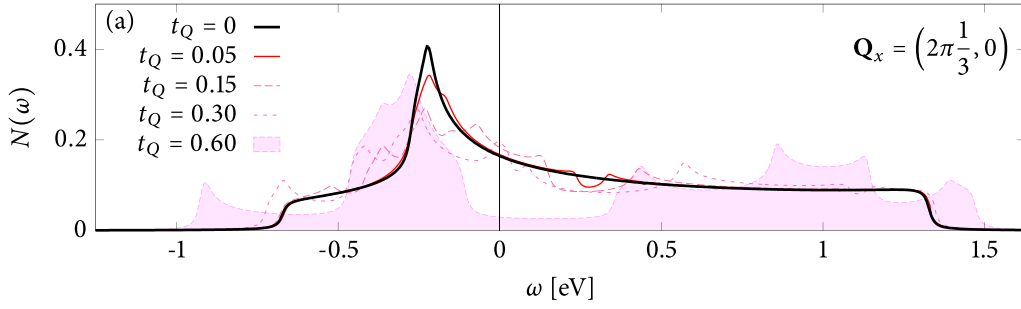


Figure 18. Densité d'états en champ moyen d FF-DW unidirectionnel. Exception à la règle, pour $t_Q = 0.6$, un gap apparaît au niveau de Fermi ($\omega = 0$). Les paramètres de bande sont $(t't') = (-0.3, 0.2)$ et le dopage est fixé à $p = 0.12$. Un seul vecteur d'onde $\mathbf{Q} = (2\pi\frac{1}{3}, 0)$ est utilisé.

y mettait le niveau de Fermi. Les gaps complets y tombent précisément, n'y laissant que la densité d'états provenant de l'élargissement dû à η . Pour le cas $Q = 2\pi\frac{3}{10}$, les gaps sont un peu à l'écart des remplissages $\frac{1}{3}$ et $\frac{2}{3}$, conséquence de l'incommensurabilité. La position des gaps complets n'en demeure pas moins fixée, le remplissage au gap est simplement différent.

Le résultat important de la figure 17 est que tous les gaps de l'ordre d FF-DW apparaissent loin du niveau de Fermi, même à champs moyens élevés.

La figure 18 montre l'exception à cette règle, pour le cas unidirectionnel, c'est-à-dire avec $\mathbf{Q}_x = (Q, 0)$ seulement. Un grand gap (~ 0.5 eV) très asymétrique atteint le niveau de Fermi pour $p = 0.12$. L'explication est simple. L'ordre unidirectionnel laisse les énergies propres inaltérées en y . Elles ont donc toute la largeur de bande due à la dispersion en y ($\sim 4t$) pour se chevaucher. Les gaps sont donc partiels même à de très grandes valeurs de champ moyen, ce qui peut les mener très loin des dopages prescrits par le vecteur \mathbf{Q} utilisé. Un tel gap n'apparaît au niveau de Fermi qu'en s'étendant d'une énergie plus basse ou plus élevée.

11.4 Rôle des ondes de densité pour le pseudogap

En résumé, un gap d'onde de densité est fixé en \mathbf{k} . Lorsqu'il est total, il n'apparaît au niveau de Fermi que pour un remplissage précis, déterminé par le vecteur d'onde \mathbf{Q} . Lorsque le gap est partiel, il est très asymétrique, car il correspond à l'extrémité d'une bande qui en chevauche une autre. Sa position en énergie est alors fortement dépendante de la structure de bande; elle correspond à l'énergie pour laquelle le vecteur d'onde \mathbf{Q} s'emboîte parfaitement (au sens de *nesting*) dans la dispersion. Pour l'ordre d FF-DW, tous les gaps obtenus étaient loin du niveau de Fermi, excepté pour le cas unidirectionnel, où un champ moyen très fort

était nécessaire. En supposant que le champ moyen diminue avec la température, on s'attend donc à ce que ce gap quitte le niveau de Fermi avant de se fermer complètement.

Le pseudogap se retrouve toujours exactement au niveau de Fermi, à toutes les températures. On peut donc en déduire qu'il se forme précisément au niveau de Fermi. Il est parfois de forme très asymétrique, mais il est centré à $\omega = 0$ (voir expériences STM de la figure 7). Les ondes de densité observées dans les cuprates correspondent à l'ordre d_{FF} -DW avec les mêmes vecteurs d'onde \mathbf{Q} que ceux étudiés dans cette section et la condition d'emboîtement a été écartée par l'expérience [79]. Comme le champ moyen d_{FF} -DW ne cause pas de gap centré au niveau de Fermi, on peut conclure que ces ondes de densité ne sont pas responsables de l'ouverture du pseudogap dans les cuprates.

Cette conclusion est limitée aux ondes de densité ayant des vecteurs \mathbf{Q} constants. Un vecteur d'onde variant dans la zone de Brillouin, $\mathbf{Q}(\mathbf{k})$ comme dans les travaux de Patrick Lee [81] et ceux de Catherine Pépin [82], ou encore une distribution continue de vecteurs d'onde, $H^{DW} = \int d^2q t(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}}$, mèneraient assurément à des résultats différents. De telles configurations en \mathbf{Q} correspondent à des structures inhomogènes dans l'espace rappelant le désordre observé en STM. Il s'agit là d'un aspect du problème qui dépasse la portée de cette thèse.

12 Ondes de densité et sous-structures du gap de type d

12.1 Champ moyen antiferromagnétique

Les sous-structures du gap de type d les plus simples sont causées par un champ moyen antiferromagnétique. La figure 19 montre comment ces sous-structures apparaissent et on explique ci-dessous comment elles sont causées par le chevauchement des bandes E^+ et E^- .

La figure 19 (a) reprend la densité d'états en champ moyen antiferromagnétique de la figure 15(f). Le champ est légèrement plus fort, $M = 1$, pour isoler chaque portion du chevauchement. Les cinq positions identifiées dans la figure 19 (a) correspondent aux potentiels chimiques utilisés aux figures 15(b) à 15(f). Lorsque le potentiel chimique est sous la zone de chevauchement (figure 15(b)), et qu'on ajoute la supraconductivité de type d , le gap s'ouvre dans la pochette de trous seule. Le gap a alors la forme en «V» caractéristique d'un gap de type d . Lorsque les pochettes d'électrons apparaissent (figure 15(c) et 15(d)), le gap présente deux paires de pics de cohérence; comme deux gaps en «V» l'un dans l'autre. Le plus petit des deux gaps constitue ce qu'on entend par «sous-structure». Enfin, lorsque la pochette de trous disparaît (figure 15(e) et 15(f)), la sous-structure disparaît également.

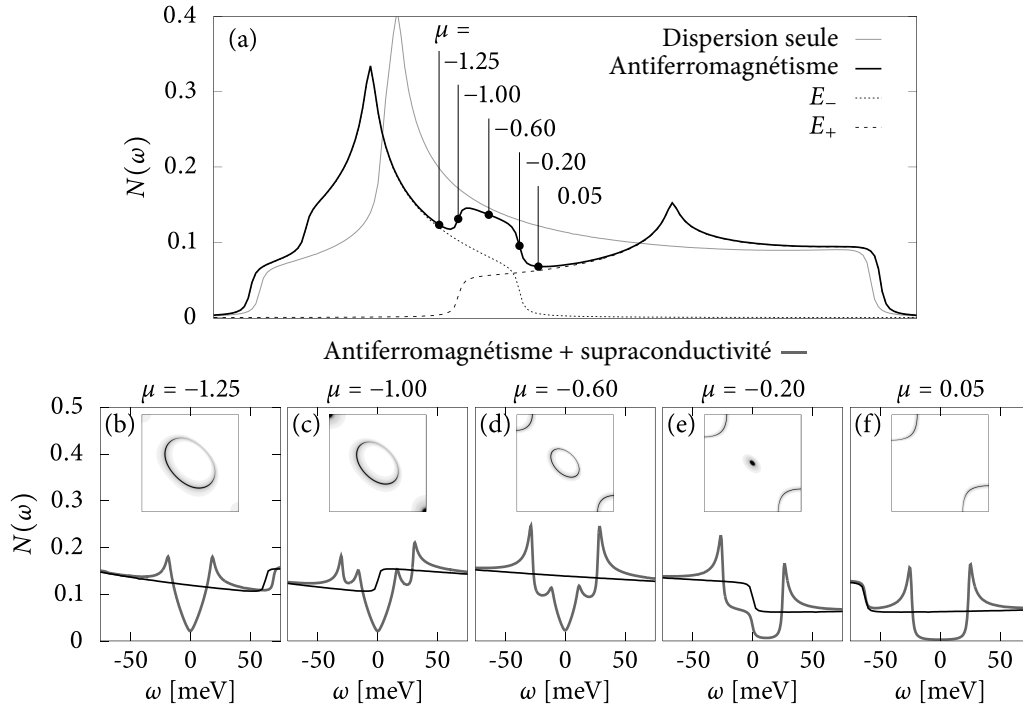


Figure 19. Sous-structures du gap supraconducteur de type d en présence d'antiferromagnétisme (a) Densité d'états pour $(t', t'') = (-0.3, 0.2)$ et $\mu = 0$. La ligne pâle indique la densité d'états sans champ moyen ($M = 0$), la ligne foncée est pour un champ moyen antiferromagnétique $M = 1$. Les lignes pointillées indiquent les contributions des bandes E^+ et E^- dans le cas $M = 1$. Cinq points sont identifiés sur la courbe foncée, correspondant aux potentiels chimiques utilisés pour les autres panneaux. (b-f) Surfaces de Fermi et densités d'états pour $M = 1$ en coexistence avec un champ moyen supraconducteur de type d avec $\Delta = 0.03$. Chaque panneau correspond un potentiel chimique μ donné : (b) $\mu = -1.25$ tombant sous la zone de chevauchement des bandes E^+ et E^- , (c) $\mu = -1.00$ au début de la zone de chevauchement, (d) $\mu = -0.60$ au centre, (e) $\mu = -0.20$ à la fin, et (f) $\mu = 0.05$ au-dessus. Dans chaque cas, le champ moyen supraconducteur est de type d avec $\Delta(\mathbf{k}) = \frac{\Delta}{2}(\cos k_x - \cos k_y)$. L'abscisse est donnée en énergie en prenant $t = 250$ meV.

Le gap restant ressemble alors davantage à un gap de type s en «U» qu'à un gap de type d en «V». Pourtant, dans chaque cas, le champ moyen supraconducteur est bien de type d .

Un gap supraconducteur ne s'ouvre qu'à la surface de Fermi. Or, puisque le gap de type d est modulé par le facteur de forme $\cos k_x - \cos k_y$, la position en \mathbf{k} de la surface de Fermi est particulièrement déterminante pour la taille et la forme du gap dans la densité d'états.

La figure 20 montre le gap sur la surface de Fermi avec et sans le champ moyen antiferromagnétique. Le dopage est choisi afin d'obtenir à la fois des pochettes de trous et d'électrons. Sans champ moyen, on retrouve la forme en «V» habituelle du gap de type d : la portion antinodale de la surface de Fermi, près de $(0, \pi)$ et $(\pi, 0)$, où le gap sature,

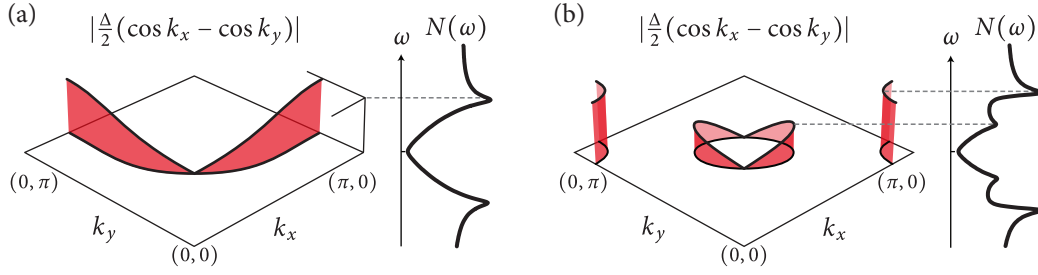


Figure 20. Origine des sous-structures de gap. Valeur du gap $|\frac{\Delta}{2}(\cos k_x - \cos k_y)|$, avec $\Delta = 0.03$, aux vecteurs \mathbf{k}_F de la surface de Fermi avec la densité d'états correspondante pour : (a) dispersion simple, $\xi(\mathbf{k}) = 0$, et (b) avec champ moyen antiferromagnétique, $E^+(\mathbf{k}) = 0$ et $E^-(\mathbf{k}) = 0$ pour $M = 1$. Les paramètres de bande sont $(t', t'') = (-0.3, 0.2)$ et le potentiel chimique est $\mu = -0.75$. Les pics de cohérence communs aux deux cas viennent de la portion antinodale, près de $(0, \pi)$ et $(\pi, 0)$, où la valeur de $\cos k_x - \cos k_y$ sature. La sous-structure obtenue en champ moyen antiferromagnétique correspond au gap de type d de la pochette de trous seule.

produit les fameux pics de cohérence. La portion nodale, elle, près de $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ produit le «V» caractéristique. Avec le champ moyen antiferromagnétique, cependant, la surface de Fermi est divisée. La pochette de trous occupe seule la portion nodale et la pochette d'électrons la portion antinodale. On voit maintenant d'où vient la sous-structure : en se refermant, la pochette de trous produit une nouvelle zone de saturation pour la valeur du gap, et génère ainsi ses propres pics de cohérence, alors que les pochettes d'électrons produisent les pics de cohérence extérieurs. On comprend aussi que, sans la pochette de trous, le gap n'a plus de contribution nodale qui cause la forme en «V», ce qui explique pourquoi le gap de la figure 19(f) est en «U» plutôt qu'en «V».

Malheureusement, cette explication des sous-structures de gap en champ moyen antiferromagnétique est limitée. Premièrement, elle suppose que la surface de Fermi reste intacte à l'ouverture du gap supraconducteur, alors qu'en réalité, ce dernier peut déformer les valeurs propres de l'onde de densité. Une simple analyse de la surface de Fermi avant l'ouverture du gap est alors trompeuse pour déterminer la densité d'état. En conséquence, bien que les calculs de densité d'états présentés ici soient valides pour toutes valeurs de M et D , l'analyse de la figure 20 n'est valide que pour $\Delta \ll M$. Pour analyser la densité d'états du cas limite opposé, c'est-à-dire avec $M \ll \Delta$, mieux vaudrait considérer la reconstruction par $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ des bandes supraconductrices $E(\mathbf{k}) = \sqrt{\xi(\mathbf{k})^2 + \Delta^2}$ plutôt que l'ouverture d'un grand gap supraconducteur sur une surface de Fermi marginalement reconstruite. Deuxièmement, pour une valeur de \mathbf{Q} générale, il peut y avoir ambiguïté sur la valeur du gap de type d à utiliser pour produire une figure comme la figure 20(b). Dans le cas antiferromagnétique, il n'y a pas d'ambiguïté car la valeur du gap $\frac{\Delta}{2}(\cos k_x - \cos k_y)$, est la même pour \mathbf{k} et $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$. En général, toutefois, les énergies propres d'une onde de densité sont définies dans une

zone de Brillouin réduite beaucoup plus petite, et la valeur de $\frac{\Delta}{2}(\cos k_x - \cos k_y)$ n'est pas la même pour \mathbf{k} et $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$. Difficile, alors, de produire une image comme la figure 20 car une même portion de la surface de Fermi dans la zone de Brillouin réduite serait associée à plusieurs valeurs de gap dans la zone de Brillouin originale. La solution à ce problème est probablement de considérer la distribution du poids spectral dans la zone de Brillouin originale, mais cette idée n'a pas été explorée suffisamment pour conclure. On gardera simplement en tête que la surface de Fermi est révélatrice, mais insuffisante pour comprendre toutes les sous-structures du gap de type d en présence d'ondes de densité.

12.2 Champ moyen d FF-DW et s' PDW

Dans les cuprates, le gap supraconducteur coexiste avec l'ordre d FF-DW. La figure 21 montre les gaps supraconducteurs pour les neuf cas obtenus en combinant les paramètres de bande $(t', t'') = (-0.33, 0.3)$, $(t', t'') = (-0.3, 0.2)$ et $(t', t'', t''', t''') = (-0.51, 0.07, -0.05, -0.06)$ avec les vecteurs d'onde $Q = \frac{2\pi}{4}$, $Q = 2\pi\frac{3}{10}$ et $Q = \frac{2\pi}{3}$. En plus de l'ordre d FF-DW (en rouge), l'ordre de densité de paires s' PDW mesuré en STM [96] est aussi considéré aux mêmes vecteurs d'onde (en bleu) ainsi que la combinaison des deux (en vert).

Les ordres d FF-DW et s' PDW causent plusieurs déformations dans le gap de type d . Ces déformations sont au moins autant influencées par la structure de bande en jeu que par le vecteur d'onde utilisé. Elles varient d'un cas à l'autre sans tendances claires. On retrouve des pics de cohérence réduits (figure 21(b), 21(c), 21(f), et 21(i), courbes vertes), des changements de la taille du gap (figure 21(b), 21(f) et 21(i), courbes rouges), et dans certains cas peu ou simplement pas de déformations (figure 21(a), 21(d), 21(g), et 21(h), courbes rouges et vertes).

L'ordre s' PDW cause parfois l'apparition d'un petit pseudogap au niveau de Fermi. C'est le cas aux figures 21(b), 21(f) et 21(i) pour l'ordre s' PDW seul (courbes pointillées bleues). Ce gap est causé par les processus de diffusion d'ordre élevé permis par notre calcul exact. Il correspond à un gap supraconducteur à $\mathbf{Q} = 0$. Il apparaît aussi dans la coexistence entre d FF-DW et s' PDW, dont les processus hybrides aident la formation. On le voit dans tous les panneaux de la figure 21 pour la coexistence des ordres d FF-DW et s' PDW sans le champ moyen supraconducteur de type d (courbes pointillées vertes). Toutefois, pour que ce gap atteigne la taille observée du pseudogap, il faudrait que les champs moyens d FF-DW et s' PDW soient beaucoup plus grands que le champ moyen supraconducteur ($t_Q \gg \Delta$ et $\Delta_Q \gg \Delta$), alors que les expériences suggèrent des valeurs comparables [157]. Cette possibilité n'a donc pas été explorée davantage.

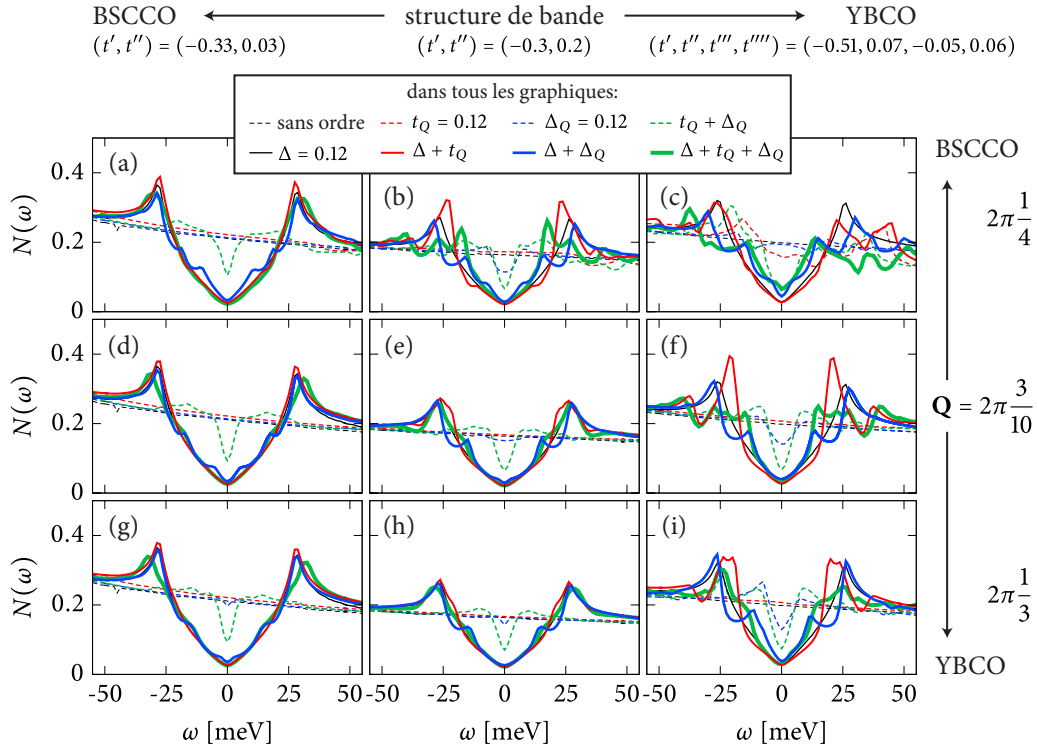


Figure 21. Déformations du gap de type d en champ moyen d FF-DW et s' PDW. Les lignes pleines et pointillées sont les densités d'états respectivement avec et sans supraconductivité. Elles sont présentées sans onde de densité en noir, avec l'ordre d FF-DW en rouge, avec l'ordre s' PDW en bleu, ou avec les deux en vert. Les panneaux (a), (b) et (c) sont obtenus pour le vecteur d'onde $Q = \frac{2\pi}{4}$; (d), (e) et (f) pour $Q = 2\pi\frac{3}{10}$, et (g), (h) et (i) pour $Q = \frac{2\pi}{3}$. Perpendiculairement, (a), (d) et (g) correspondent aux paramètres de bande $(t', t'') = (-0.33, 0.3)$; (b), (e) et (h) : $(t', t'') = (-0.3, 0.2)$; et (c), (f) et (i) : $(t', t'', t''', t''') = (-0.51, 0.07, -0.05, -0.06)$.

Enfin, il faut souligner tout particulièrement les sous-structures du gap supraconducteur de type d obtenues en présence de l'ordre s' PDW (courbes bleues). Ces sous-structures sont les plus semblables aux observations expérimentales, en particulier celles de la figure 10. Des sous-structures peuvent aussi apparaître en présence de l'ordre d FF-DW (figure 21(b), courbe rouge), mais elles ne se comparent pas aussi bien à l'expérience. Il est donc plausible que les vortex amplifient les ondes de paires de l'ordre s' PDW, comme prédit dans les travaux d'Agterberg et Garaud [90], et que celles-ci soient responsables des sous-structures, comme calculé ici.

Les champs moyens d FF-DW et s' PDW à longue portée utilisés ici doivent probablement être vus comme des approximations locales. En effet, les spectres expérimentaux de la figure 10 varient de position en position en présentant une variété de déformations étonnamment similaires à celle de la figure 21. Hypothétiquement, on pourrait peut-être

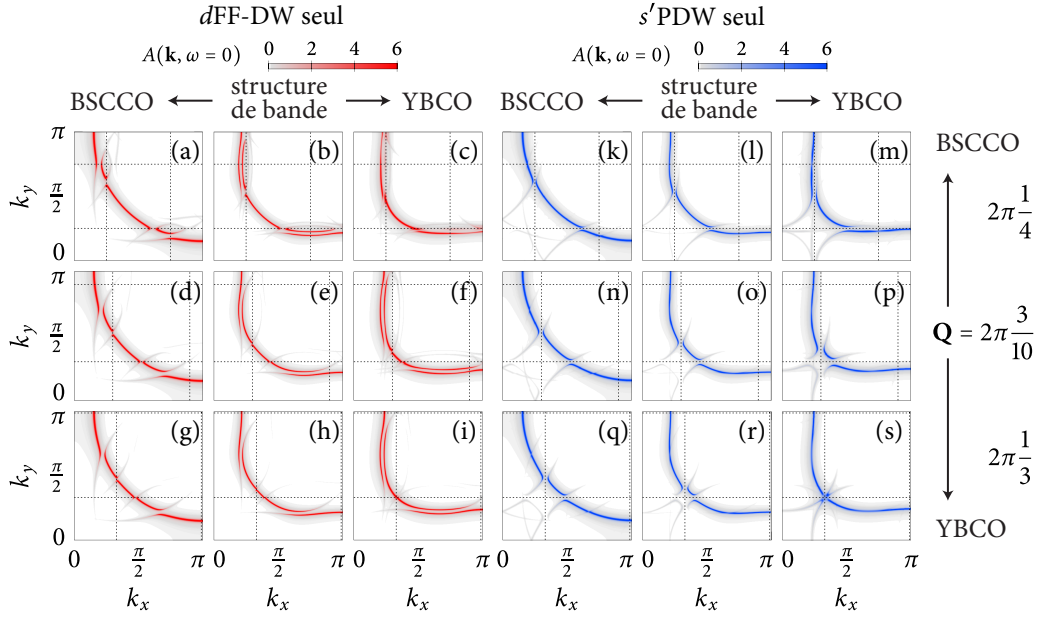


Figure 22. Surfaces de Fermi en champ moyen d FF-DW et s' PDW Obtenues pour les mêmes systèmes que les densités d'états de la figure 21, (a)-(i) en rouge pour le champ moyen d FF-DW seul et (j)-(r) pour le champ moyen s' PDW seul.

assigner à chaque position une combinaison de paramètres de bande, de vecteurs d'onde et d'amplitudes champ-moyens pour obtenir un accord quantitatif avec les spectres mesurés.² Vu le nombre de paramètres libres, cette hypothèse n'a pas été poursuivie. Toutefois, sa plausibilité illustre la viabilité des champs-moyens d FF-DW et s' PDW à longue portée comme approximations locales des ordres à courte portée présents dans les cuprates.

Une telle interprétation locale clarifie aussi la portée des surfaces de Fermi obtenues à la figure 22. Ces dernières sont pour les mêmes champs moyens d FF-DW et s' PDW qu'à la figure 21. De telles surfaces de Fermi n'ont jamais été observées en ARPES, probablement à cause de la courte portée des ondes de densité expérimentales. Cependant, les surfaces de Fermi de la figure 22 aident à comprendre la diversité des déformations obtenues à la figure 21. En effet, aucune portion de la surface de Fermi n'y est complètement effacée par un gap, ce qui est cohérent avec les résultats de la section précédente, montrant qu'aucun gap n'apparaît au niveau de Fermi sans supraconductivité (figure 17). À la place, chacune de ces surfaces de Fermi présente une multitude de pochettes de trous et d'électrons. Considérant l'explication des sous-structures présentées à la figure 20 de la section précédente (et gardant en tête ses limitations), on comprend comment cette multitude de pochettes peut mener à la multitude de sous-structures obtenues dans les gaps de types d correspondants.

2. Une telle approximation se voudrait dans la lignée de l'approximation du cristal virtuel [158, 159]

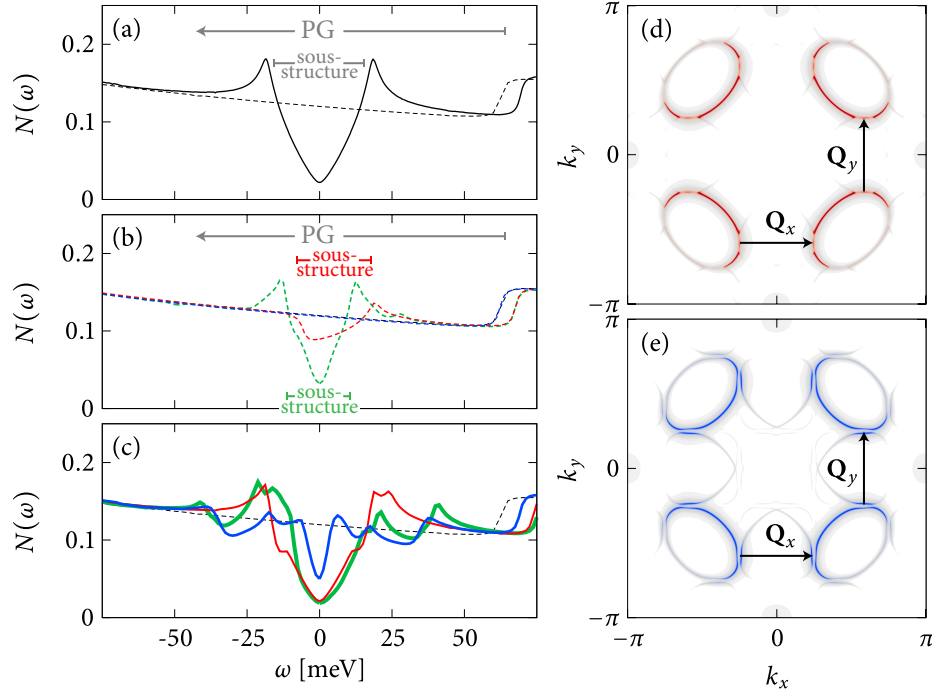


Figure 23. Densité d'états pour des combinaisons de champs moyens SC, AF, d FF-DW et s' PDW (a) Mêmes résultats qu'à la figure 19(b), montrant que le gap supraconducteur dans le gap partiel AF peut être interprété comme un double gap. (b) Densité d'états sans la supraconductivité, pour les ordres d FF-DW et s' PDW dont les vecteurs d'onde Q_x et Q_y s'emboîtent dans la surface de Fermi. (c) Densité d'états avec la supraconductivité coexistant avec les ordres d FF-DW et s' PDW. La légende est la même que celle de la figure 21 : les lignes pleines et pointillées sont les densités d'états respectivement avec et sans supraconductivité de type d . Elles sont présentées sans ondes de densité en noir, avec l'ordre d FF-DW en rouge, avec l'ordre s' PDW en bleu, ou avec les deux en vert. (d) Surface de Fermi en champs moyens AF et d FF-DW coexistants, montrant que l'emboîtement des vecteurs d'onde Q_x et Q_y cause l'effacement d'une portion de la surface de Fermi antiferromagnétique. (e) Surface de Fermi en champs moyens AF et s' PDW coexistants, montrant que l'emboîtement de l'onde de densité de paires ne cause pas d'effacement.

12.3 Pseudogap de type AF avec ondes de densité

Malgré que les ordres d FF-DW et s' PDW soient observés en STM, la section 11.4 montre qu'ils ne causent pas de pseudogap dans la densité d'états. Ce dernier est donc un phénomène additionnel et on doit s'intéresser aux résultats de sa coexistence avec l'ordre d FF-DW et s' PDW. Notamment, comme les vecteurs d'ondes de densité observés ne s'emboîtent pas dans la surface de Fermi originale, une hypothèse courante est qu'ils s'emboîteraient plutôt dans la surface de Fermi déjà modifiée par le pseudogap [79, 160]. Cette section présente quelques prédictions d'une telle hypothèse.

La section 9 suggère de réduire les théories phénoménologiques du pseudogap à deux catégories : celles inspirées de l'ordre supraconducteur de type d (type SC) et celles inspirées de l'ordre antiferromagnétique (type AF). Comme la section précédente traite déjà de la coexistence entre les ordres d FF-DW, s' PDW, et la supraconductivité de type d , on ne s'intéresse ici qu'au deuxième type : les pseudogaps de type AF. On présume donc que les résultats devraient être représentatifs des théories YRZ (section 14.4) et $FL^* U(1)$ [156], par exemple.

L'ordre antiferromagnétique et ses gaps sont bien décrits à la section 11.2. Le pseudogap le plus plausible dans ce système est le gap partiel retrouvé pour $\mu = -1.25$ à la figure 19(a). L'ajout d'un gap supraconducteur à ce pseudogap est déjà illustré à la figure 19(b).

Le même système est repris à la figure 23 avec l'ajout des ordres d FF-DW et s' PDW. Ce modèle montre trois possibilités supplémentaires pour expliquer le double gap observé en STM. Premièrement, la figure 23(a) reprend les résultats exacts de la figure 19(b) pour souligner que le gap de type d apparaissant dans le pseudogap AF peut être vu comme un double gap en soi : le grand gap serait le pseudogap et la sous-structure serait le gap supraconducteur. Ce scénario explique difficilement les sous-structures apparaissant dans les coeurs de vortex, où la supraconductivité est supprimée. Deuxièmement, à la figure 23(b), les vecteurs d'onde de l'ordre d FF-DW s'emboîtent dans les pochettes de trous du pseudogap. Un gap partiel provenant de l'ordre d FF-DW apparaît alors exactement au niveau de Fermi, dans le pseudogap AF, formant aussi un double gap (courbe pointillée rouge). D'ailleurs, la figure 23(d) montre la surface de Fermi correspondante, où une portion de la pochette de trous est effacée. Ce scénario explique bien les sous-structures des coeurs de vortex, mais pas celle à champ nul, comme expliqué au paragraphe suivant. C'est aussi le spectre attendu à fort champ magnétique, lorsque la supraconductivité est complètement supprimée, supposant que l'ordre de charge coexiste alors seul avec un pseudogap de type AF. L'ordre s' PDW aux mêmes vecteurs d'onde, pour sa part, ne cause pas de gap au niveau de Fermi. En effet, à la figure 23(e), on voit qu'au lieu d'effacer certains segments de la surface de Fermi, l'emboîtement de l'onde de paires les sépare plutôt en deux.³ Troisièmement, toujours à la figure 23(b), quand les ordres d FF-DW et s' PDW coexistent (courbe verte pointillée), un autre gap peut s'interpréter comme une sous-structure du pseudogap AF. Ce dernier est un gap supraconducteur homogène venant des processus de diffusion d'ordre élevé, comme ceux mentionnés plus haut.

La figure 23(c) présente finalement le cas où tous les ordres coexistent. On ne trouve alors pas un double gap, mais plutôt une multitude de déformations de la densité d'états. C'est

3. Les gaps d'une onde de paires correspondent aux anticroisements de ξ_k avec $-\xi_{-k-Q}$, menant à une dynamique bien différente de celle des ondes de charge.

un résultat problématique pour les pseudogaps de type AF. En effet, d'une part, aucune des trois possibilités présentées n'offre un accord avec les résultats expérimentaux de la figure 10 aussi impressionnant que les gaps supraconducteurs de la figure 21. D'autre part, les trois cas précédents ont le problème important qu'aucun ne combine un gap supraconducteur et les ondes de densité observée en STM. En fait, lorsque tous les ingrédients sont réunis, à la figure 23(c), la densité d'états obtenue ne ressemble plus aux observations expérimentales. Si ces ordres sont bien distincts dans les expériences, cela suggère qu'ils ne coexistent pas à l'échelle microscopique.

13 Récapitulatif

Rappelons que, dans ce chapitre, le pseudogap réfère au spectre observé en STM à basse température dans les coeurs de vortex et dans les échantillons sous-dopés, et que ce dernier n'est pas nécessairement associé à la température T^* . À la section 11, nous avons déterminé que les gaps d'onde de densité sont fixés en \mathbf{k} et que pour une valeur de \mathbf{Q} donnée, le gap total n'apparaît au niveau de Fermi qu'à un remplissage donné. Autrement, il est asymétrique et sa position en énergie dépend fortement de la structure de bande. Le gap ne se retrouve à l'énergie de Fermi qu'en cas d'emboîtement, et pour la bande H_0 de l'équation (13), cette condition a été écartée par l'expérience [79]. Les ondes de densité sont donc de mauvais candidats pour expliquer le pseudogap.

Enfin, les résultats de la section 12 permettent de conclure qu'en ce qui concerne les sous-structures du gap observé en STM, les théories de type SC en combinaison avec des ondes de densité s'accordent mieux aux expériences que celles du type AF en combinaison avec des ondes de densité. Loin de signifier que le pseudogap est un état supraconducteur, cela suggère toutefois que le pseudogap n'est pas complètement distinct de l'état supraconducteur ; l'un se muterait peut-être en l'autre et vice versa [82, 151, 152]. Une chose est certaine, un pseudogap de type AF explique mal les structures spectrales observées en STM, ce qui constitue une lacune importante pour ce type de modèles.

CHAPITRE IV

TRANSPORT DANS LE PSEUDOGAP

Ce chapitre présente les trois théories phénoménologiques du pseudogap utilisées par Storey [109] et Eberlein [110] pour reproduire les résultats expérimentaux du nombre de Hall : le modèle AF, le modèle sAF et la théorie YRZ. Les éléments distinctifs de chaque modèle sont présentés séparément aux sections 14.1, 14.2, 14.4 suite à quoi la définition des modèles est donnée dans un formalisme unifié à la section 15. On présente aussi un modèle d'ondes de densité de spin incommensurables colinéaires (section 14.3). Ce dernier ne permet pas de reproduire aussi bien l'expérience, mais permet d'isoler le point commun faisant la force des trois modèles précédents : ils divisent la dispersion en deux bandes exactement. On établit ensuite les prédictions de ces trois modèles pour deux autres quantités mesurables dans les mêmes conditions que le nombre de Hall : la chaleur spécifique et le coefficient Seebeck. Ces prédictions permettent de souligner l'importance de pochettes d'électrons anti-nodales présentes dans ces modèles.

14 Théories phénoménologiques du pseudogap

14.1 Modèle AF

Le modèle AF de Storey [109] est exactement le même qu'à la section 8.1, à l'exception de la valeur du champ moyen M qui change en fonction du dopage : $M \rightarrow M(p)$. Cependant, pour inclure le modèle AF au formalisme unifié de la section 15, on doit lui apporter deux simplifications :

$$H^{\text{AF}} = \sum_{\mathbf{k} \in BZ} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & M \\ M & \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow} \end{pmatrix}, \quad (67)$$

La première est de ne considérer que le bloc de spin up et la deuxième est de ramener la somme sur \mathbf{k} à la zone de Brillouin originale plutôt que la zone de Brillouin réduite. Ces deux modifications se compensent. En effet, la seule différence entre le spin up et le spin

down est le signe du champ moyen, menant donc aux mêmes valeurs propres $E_{\mathbf{k}}$ dans la zone de Brillouin réduite. On peut donc travailler avec les spins up seulement, et multiplier le nombre d'états par deux pour compter le spin down. Plutôt que de multiplier par deux explicitement, toutefois, on utilise le fait que la zone de Brillouin originale contient deux fois les mêmes états, car $E_{\mathbf{k}}$ a la périodicité de la zone de Brillouin réduite. Les états en dehors de la zone de Brillouin réduite comptent donc comme les états de spin down.

14.2 Modèle sAF

L'hamiltonien champ-moyen de l'onde de densité de spin incommensurable spirale, ou antiferromagnétisme spiral, est constitué d'opérateurs $c_{\mathbf{r},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r},\downarrow}$ contenant les deux spins :

$$H_Q^{\text{sAF}} = \sum_{\mathbf{r}} M e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} c_{\mathbf{r},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r},\downarrow} + \text{c.h.} \quad (68)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} M c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\downarrow} + \text{c.h.} \quad (69)$$

Exceptionnellement, il n'est donc pas un cas particulier du hamiltonien (42). En combinaison avec la bande H_0 , il fournit le point de départ au modèle sAF d'Eberlein [110, 161] :

$$H_0 + H_Q^{\text{sAF}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & M \\ M & \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (70)$$

où \mathbf{Q} est incommensurable et dépend du dopage selon $\mathbf{Q}(p) = (\pi - 2\pi p, \pi)$ [110, 162] et où la somme sur \mathbf{k} est sur toute la zone de Brillouin originale. Puisque l'hamiltonien (70) couple les spins up et down, les contributions de ces derniers au poids spectral sont différentes, et il faudra les compter séparément, contrairement au modèle AF.

Prendre $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ dans l'hamiltonien (70) mènerait aux mêmes valeurs propres que pour le modèle AF. L'antiferromagnétisme serait toutefois dans le plan, c'est-à-dire perpendiculaire à l'axe de quantification du spin. L'orientation de cet axe n'a cependant pas d'importance, et donc le modèle AF pourrait être formulé comme un modèle sAF à $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. L'inverse n'est pas vrai : le modèle sAF ne correspond pas au modèle AF incommensurable avec $\mathbf{Q}(p) = (\pi - 2\pi p, \pi)$. C'est ce qui distingue l'antiferromagnétisme incommensurable spiral de l'antiferromagnétisme incommensurable colinéaire, comme brièvement expliqué à la section suivante.

14.3 Onde de densité de spin incommensurable colinéaire

Dans le cas spiral de la section précédente, c'est l'orientation du spin et non sa densité qui oscille de manière incommensurable avec le réseau [161]. Pour cette raison, utiliser une matrice 2×2 avec un vecteur d'onde \mathbf{Q} incommensurable n'est pas une approximation.

Dans le cas colinéaire, toutefois, c'est la densité de spin qui oscille, et donc la taille de la matrice dépend du vecteur d'onde comme expliqué à la section 10.5. Le modèle considéré pour étudier cette différence est identique à l'hamiltonien de champ moyen anti-ferromagnétique (17), mais on l'utilise avec le vecteur d'onde $\mathbf{Q} = (\pi + \frac{2\pi}{6}, \pi)$ correspondant approximativement à celui observé expérimentalement à $p \approx 0.166$ dans LSCO [163]. Il doit alors être traité dans la représentation matricielle générale de la section 10.5 comme un cas particulier du hamiltonien (42) avec $t_{(\pi + \frac{2\pi}{6}, \pi), 0, \sigma} = \sigma M$. Il mène à six énergies propres non dégénérées.

14.4 Théorie Yang-Rice-Zhang (YRZ)

Le point de départ de la théorie Yang-Rice-Zhang [119] n'est pas un hamiltonien, mais plutôt un *ansatz* pour la partie cohérente de la fonction de Green :

$$G_{\mathbf{k}}^{\text{YRZ}}(\omega) \equiv \frac{g_t(p)}{\omega - \xi_{\mathbf{k}}^g(p) - \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}}(p)|^2}{\omega - \xi_{\mathbf{k}}^0(p)}} + G_{\text{inc.}} \quad (71)$$

Cette dernière fait intervenir une dispersion renormalisée par les facteurs de Gutzwiller :

$$\begin{aligned} \xi_{\mathbf{k}}^g(p) = & -(g_t(p) + \frac{3\chi J}{8} g_s(p)) \cdot 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \\ & - g_t(p) \cdot 2t'(\cos(k_x a + k_y a) + \cos(k_x a - k_y a)) \\ & - g_t(p) \cdot 2t''(\cos(2k_x a) + \cos(2k_y a)) - \mu, \end{aligned} \quad (72)$$

où $g_t(p) = \frac{2p}{1+p}$ et $\frac{3\chi J}{8} g_s(p) = \frac{0.169}{(1+p)^2}$ sont les facteurs de Gutzwiller standards et dépendent du dopage¹. Ces facteurs servent à simuler la perte du caractère métallique de la bande à l'approche de l'isolant de Mott [164]. Bref, alors que l'équation (14) correspond à une bande sans interaction, l'équation (72) représente la bande aplatie d'un isolant de Mott dopé.

1. Notons que les paramètres utilisés par Storey [109] dans son modèle AF sont les paramètres modifiés par les facteurs de Gutzwiller du dopage $p = 0.15$, qu'il utilise toutefois à tous les dopages.

L'*ansatz* (71) fait aussi intervenir la dispersion :

$$\xi_{\mathbf{k}}^0(p) = 2t(g_t(p) + \frac{3\chi J}{8}g_s(p))(\cos(k_x) + \cos(k_y)), \quad (73)$$

qui coïncide avec le premier terme de $-\xi_{\mathbf{k}}^g(p)$ et qui ouvre le gap à la surface dite «umklapp» de la théorie YRZ. De plus, $\xi_{\mathbf{k}}^0(p)$ correspond aussi au premier terme de $\xi_{\mathbf{k}+(\pi,\pi)}^g(p)$, et la surface umklapp correspond à la frontière de la zone de Brillouin antiferromagnétique, expliquant la ressemblance avec le modèle AF.

La théorie YRZ couple les dispersions $\xi_{\mathbf{k}}^g(p)$ et $\xi_{\mathbf{k}}^0(p)$ avec un champ moyen à facteur de forme de type d qui décroît avec le dopage entre $0 < p < 0.2$:

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}}(p) = \frac{3t}{2}(\cos(k_x) - \cos(k_y))(0.2 - p). \quad (74)$$

Sa valeur maximale est donc aux antinœuds, $\Delta_{(0,\pi)}^{\text{PG}} = -\Delta_{(\pi,0)}^{\text{PG}} = 3t(0.2 - p)$. Toutefois, avec les facteurs de Gutzwiller qui aplatissent la bande, la taille relative du gap par rapport à la largeur de bande est amplifiée.

Enfin, l'*ansatz* (71) peut aussi être obtenu de la matrice hamiltonienne suivante :

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{YRZ}} = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}}^g & \Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}}(p) \\ \Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}}(p) & \xi_{\mathbf{k}}^0 \end{pmatrix}. \quad (75)$$

La fonction de Green associée, $\hat{G}_{\mathbf{k}}(\omega) = [\omega - \hat{H}_{\text{eff}}^{\text{YRZ}}]^{-1}$, a comme premier élément :

$$[\hat{G}_{\mathbf{k}}(\omega)]_{11} = \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}}(p) - \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}^{\text{PG}}(p)|^2}{\omega - \xi_{\mathbf{k}}^0(p)}}. \quad (76)$$

Comparé à (71), il ne manque que le facteur de renormalisation $g_t(p)$ qui soustrait le poids de la partie incohérente; $G_{\mathbf{k}}^{\text{YRZ}}(\omega) \equiv g_t(p)[\hat{G}_{\mathbf{k}}(\omega)]_{11} + G_{\text{inc.}}$. Dans ses travaux sur l'effet Hall [109], Storey a montré qu'il fallait ignorer ces deux éléments pour obtenir une bonne comparaison avec l'expérience. On fait la même chose ici.

15 Formalisme unifié des modèles AF, sAF et YRZ

15.1 Hamiltonien et valeurs propres

On utilise un formalisme hamiltonien 2×2 [165, 166, 164] pour unifier les trois modèles précédents : le modèle AF [109], le modèle sAF [110], et le modèle YRZ [109]. Toutes les différences entre les modèles sont mises en évidence au tableau 2. L'hamiltonien est :

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}. \quad (77)$$

avec le spineur $\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} & d_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{pmatrix}$ et la matrice :

$$\hat{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}}(p) & M_{\mathbf{k}}(p) \\ M_{\mathbf{k}}(p) & \xi_{\mathbf{k}}^d(p) \end{pmatrix}. \quad (78)$$

Dans chaque modèle, $c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ crée un électron de vecteur d'onde \mathbf{k} et de spin up et la somme sur \mathbf{k} est sur la zone de Brillouin originale. Cependant, les modèles ont des opérateurs $d_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ et des dispersions $\xi_{\mathbf{k}}(p)$ et $\xi_{\mathbf{k}}^d(p)$ différents, définis au tableau 2.

Inspiré de la théorie YRZ, le paramètre d'ordre de chaque modèle $M_{\mathbf{k}}(p)$ décroît avec le dopage et s'annule à $p^* = 0.2$:

$$M_{\mathbf{k}}(p) = \begin{cases} M_{\mathbf{k}} \cdot (p^* - p) & \text{pour } 0 < p < p^* \\ 0 & \text{autrement.} \end{cases} \quad (79)$$

Les modèles ont différents $M_{\mathbf{k}}$ donnés au tableau 2. Les valeurs de $M_{\mathbf{k}}$ sont choisies pour produire des rapports entre le gap et la largeur de bande comparables d'un modèle à l'autre. Ces derniers sont illustrés à la figure 24 pour les trois modèles.

Une transformation unitaire $\hat{U}_{\mathbf{k}}$ donne accès aux valeurs propres $E_{n\mathbf{k}} = [\hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{H}_{\mathbf{k}} \hat{U}_{\mathbf{k}}]_{nn}$ du hamiltonien (78). On utilisera aussi la notation $E_{\mathbf{k}}^{\pm}$ avec la dépendance en dopage laissée implicite à partir de ce point :

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}}^d}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}^d}{2}\right)^2 + M_{\mathbf{k}}^2}. \quad (80)$$

Les quasi-particules correspondant aux états propres sont gouvernées par l'opérateur de

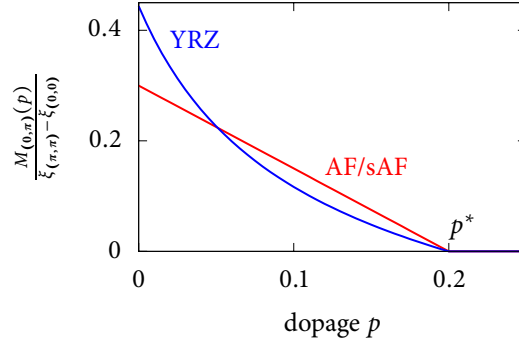


Figure 24. Rapport entre gap et largeur de bande dans les modèles AF, sAF et YRZ calculé en fonction du dopage dans les modèles AF et sAF (en rouge) et dans la théorie YRZ (en bleu). Le rapport est $\Delta_{(0,\pi)}(p)/(\xi_{(\pi,\pi)}(p) - \xi_{(0,0)}(p))$. Le gap s'annule à $p^* = 0.2$. Dans les modèles AF et sAF, $M_{\mathbf{k}}(p) = 12t(p^* - p)$ et la largeur de bande est $8t$, le ratio est donc $0.3 - 1.5p$. Dans la théorie YRZ, le gap est de type d , il est donc maximal pour $\mathbf{k} = (0, \pi)$, pour une valeur de $M_{(0,\pi)}(p) = 3t(p^* - p)$. La largeur de bande change avec le dopage comme $8t(\frac{2p}{1+p} + \frac{0.169}{(1+p)^2})$. Le ratio est donc $\frac{3}{8}(0.2 - p)/(\frac{2p}{1+p} + \frac{0.169}{(1+p)^2})$.

création $a_{n\mathbf{k}}^\dagger = [\hat{U}_{\mathbf{k}}]_{n1}c_{\mathbf{k}}^\dagger + [\hat{U}_{\mathbf{k}}]_{n2}d_{\mathbf{k}}^\dagger$. La transformation associée peut être écrite comme :

$$\hat{U}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}^d)/2}{\sqrt{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}^d)^2 + 4M_{\mathbf{k}}^2}}} & \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}^d)/2}{\sqrt{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}^d)^2 + 4M_{\mathbf{k}}^2}}} \\ -\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}^d)/2}{\sqrt{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}^d)^2 + 4M_{\mathbf{k}}^2}}} & \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}^d)/2}{\sqrt{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}^d)^2 + 4M_{\mathbf{k}}^2}}} \end{pmatrix} \quad (81)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{M_{\mathbf{k}}}{\sqrt{M_{\mathbf{k}}^2 + (\xi_{\mathbf{k}} - E_{1\mathbf{k}})^2}} & \frac{M_{\mathbf{k}}}{\sqrt{M_{\mathbf{k}}^2 + (\xi_{\mathbf{k}} - E_{2\mathbf{k}})^2}} \\ \frac{-M_{\mathbf{k}}}{\sqrt{M_{\mathbf{k}}^2 + (\xi_{\mathbf{k}} - E_{2\mathbf{k}})^2}} & \frac{M_{\mathbf{k}}}{\sqrt{M_{\mathbf{k}}^2 + (\xi_{\mathbf{k}} - E_{1\mathbf{k}})^2}} \end{pmatrix}. \quad (82)$$

15.2 Vitesse de Fermi

Les vitesses de groupe sont choisies pour correspondre à celles utilisées dans les travaux de Storey [109] et d'Eberlein [110] :

$$\mathbf{v}_{n\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} \quad (83)$$

par opposition à $\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}$. Ce choix pour la vitesse est particulièrement difficile à justifier rigoureusement [167, 168]. Storey a toutefois montré qu'il est crucial pour obtenir l'accord expérimental avec le nombre de Hall de YBCO [104] dans le modèle YRZ. Suivant son exemple, la vitesse des électrons de spin up est choisie comme $\mathbf{v}_{n\mathbf{k},\uparrow} = \mathbf{v}_{n\mathbf{k}}$, et celle des

électrons de spin down est donnée au Tableau 2.

Trois commentaires supplémentaires sont dignes de mention sur ce choix de vitesse. Premièrement, lorsque le gap devient arbitrairement petit, à p^* , la théorie du claquage (*electric breakdown*) stipule que la théorie semi-classique du transport devrait échouer [115]. Les résultats sont donc à prendre avec un bémol. Deuxièmement, la théorie semi-classique du transport pour les électrons de Bloch en champ magnétique est enracinée dans la substitution de Peierls³. Or, cette dernière n'a été justifiée complètement qu'à faible champs, pour une bande bien isolée [170]. Troisièmement et finalement, malgré ces problèmes, les seules différences obtenues entre $\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}$ et $\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}}$ dans cette thèse portent sur le calcul de σ_{xy} à $t' \neq 0$ (voir section 16.1 pour la définition de σ_{xy}). Ces différences viennent des termes de masse $\partial v_{x,n\mathbf{k}}/\partial k_y$ et $\partial v_{y,n\mathbf{k}}/\partial k_x$. Bref, la recette de Storey permet de reproduire les expériences sur le nombre de Hall, et nous la suivons pour cette raison, mais ses fondations comportent certaines faiblesses associées à la nature multi-bande des modèles utilisés.

15.3 Poids spectral

Puisque chaque énergie propre a sa vitesse, les coefficients de transport de la section 16 demandent de calculer la contribution au poids spectral provenant de chacune d'entre elles :

$$[\hat{A}_{\mathbf{k}}(\omega)]_{ij} = \sum_n [\hat{U}_{\mathbf{k}}]_{in} \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{n\mathbf{k}}}{(\omega - E_{n\mathbf{k}})^2 + \Gamma_{n\mathbf{k}}^2} [\hat{U}_{\mathbf{k}}^\dagger]_{nj} \quad (84)$$

$$\equiv \sum_n [\hat{A}_{n\mathbf{k}}(\omega)]_{ij}. \quad (85)$$

Les indices i, j numérotent les éléments de la base du spineur $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & d_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}$, l'indice n identifie la bande, \mathbf{k} couvre la zone de Brillouin originale et $\Gamma_{n\mathbf{k}}$ est le taux de diffusion (section suivante). Dans tous les modèles, le poids spectral des électrons de spin up est donné par $A_{n\mathbf{k},\uparrow} = [\hat{A}_{n\mathbf{k}}(\omega)]_{11}$, alors que celui des électrons de spin down dépend du modèle, comme donné au Tableau 2.

3. La substitution de Peierls est une approximation permettant d'ajouter un potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ à l'hamiltonien de Bloch. En général, ce problème mène à des difficultés extraordinaires [169, 170, 171]. La substitution de Peierls est connue sous deux formes : (i) dans l'approximation des liaisons fortes, elle consiste à ajouter une phase d'Arahanov-Bohm au terme saut $t_a \rightarrow t_a e^{ie \int_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}+\mathbf{a}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'}$. (ii) on peut aussi considérer la bande de Bloch $E_n(\hbar\mathbf{k})$ comme un hamiltonien classique dans lequel on substitue la quantité de mouvement $\hbar\mathbf{k}$ par sa forme covariante : $H_P \equiv E_n(\hbar\mathbf{k} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}))$, menant aux équations de Hamilton $\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial H_P}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}}$ et $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{\partial H_P}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{v}_{n\mathbf{k}} \times \mathbf{B}$ (les équations semi-classiques du mouvement). Les deux formes sont équivalentes; la deuxième fut introduite par Onsager pour justifier le travail de Shockley expliquant les oscillations quantiques [172, 173]. Dans les deux formes, la substitution de Peierls néglige de manière incontrôlée l'effet du champ magnétique sur les fonctions de Wannier $w_{n\mathbf{r}}(\mathbf{x})$ associées à la bande n [170]. Il existe des corrections à la substitution de Peierls [171, 174, 175], mais elles n'ont pas été considérées dans cette thèse.

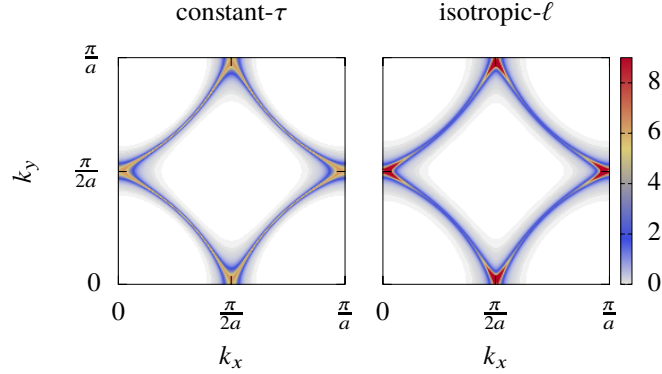


Figure 25. Poids spectral dans les approximations τ -constant et ℓ -isotrope. $A_{\mathbf{k}}(\epsilon = 0)$ aux paramètres de bande $(t', t'') = (-0.17, 0.05)$, au dopage $p = 0.24$ (juste après la singularité de van Hove à $p_{\text{vHS}} = 0.23$). La comparaison des approximations de temps de vie τ constant (gauche) et de libre parcours moyen ℓ isotrope (droite) montre que le cas ℓ -isotrope amplifie le poids spectral des états antinodaux, compensant leur plus faible vitesse.

15.4 Taux de diffusion

Encore une fois, pour suivre à la lettre les travaux de Storey [109] et d'Eberlein [110] sur l'effet Hall, mais aussi ceux de Kondo [176] et Storey [177] sur l'effet Seebeck, on considère les taux de diffusion suivants :

$$\tau\text{-constant :} \quad \Gamma_{n\mathbf{k}} = \frac{\hbar}{2\tau}, \quad (86)$$

$$\ell\text{-isotrope :} \quad \Gamma_{n\mathbf{k}} = \frac{at}{2\ell} |\mathbf{v}_{n\mathbf{k}}| + \zeta, \quad (87)$$

où $\zeta = 10^{-5}$ empêche une diffusion nulle au col de la dispersion. Les mêmes valeurs de temps de vie τ et de libre parcours moyen ℓ sont utilisées pour les deux bandes. Elles sont choisies les plus grandes possible, tout en permettant l'intégration numérique des coefficients de transports de la section 16. La principale différence entre les deux approximations est que ℓ -isotrope confère un poids spectral plus effilé aux états de faible vitesse, comme on peut le voir à la figure 25. Cela a pour effet d'amplifier la pondération de ces états dans les intégrales de transport.

Bien que les approximations (86) et (87) fussent largement utilisées [176, 177, 109, 178, 179, 180], les expériences suggèrent d'autres expressions pour $\Gamma_{n\mathbf{k}}$ [181]. Dans le modèle AF au moins, il fut vérifié[182] que ces $\Gamma_{n\mathbf{k}}$ redonnent les résultats de Storey pour le nombre de Hall [109].

15.5 Dopage

Dans les modèles AF et sAF, on trouve le potentiel chimique μ associé à un dopage p donné en inversant l'équation intégrale :

$$p = 1 - \sum_n \int \frac{d^2k}{4\pi^2} f(E_{nk}), \quad (88)$$

où les énergies propres E_{nk} dépendent de μ implicitement. À température nulle, le résultat est le même que pour la règle de Luttinger :

$$p = 1 - \sum_n \int_{\text{Re}\{G_{nk}(\omega=0)\} > 0} \frac{d^2k}{(2\pi)^2}, \quad (89)$$

où $G_{nk}^{-1}(\omega) = \omega - E_{nk} - i\Gamma_{nk}$.

Toutefois, dans la théorie YRZ, les quasi-particules créées par a_{nk}^\dagger et associées aux valeurs propres E_{nk} correspondent à des superpositions entre les électrons $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ et les excitations auxiliaires correspondants aux $d_{\mathbf{k}}^\dagger$. En conséquence, les équations (88) et (89) ne peuvent pas être utilisées et il est plutôt prescrit [119] de compter les électrons avec la règle de Luttinger suivante :

$$p^{\text{YRZ}} = 1 - 2 \int_{\text{Re}\{[\hat{G}_{\mathbf{k}}(\omega=0)]_{11}\} > 0} \frac{d^2k}{(2\pi)^2}, \quad (90)$$

où la fonction de Green est celle de l'équation (76) et dépend implicitement de μ . Formellement, le dopage calculé dans la théorie YRZ n'est donc pas comparable à celui calculé pour les modèles AF et sAF; leurs natures sont différentes : les équations (88) et (89) comptent $1 - \sum_{nk} a_{nk}^\dagger a_{nk}$ alors que l'équation (90) compte $1 - 2 \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}$, ignorant donc $\sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger d_{\mathbf{k}\uparrow}$. C'est tout de même la manière standard de procéder [119, 183, 184, 177, 109].

16 Calcul de la chaleur spécifique et des coefficients de transport

16.1 Effet Hall

Le nombre de Hall n_H et la résistivité de Hall R_H se calculent selon [167] :

$$n_H = -\frac{V}{eR_H}, \quad R_H = \frac{\rho_{yx}}{B} = \frac{-\sigma_{yx}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} - \sigma_{xy}\sigma_{yx}B^2} \approx \frac{-\sigma_{yx}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy}}, \quad (91)$$

Tableau 2. Différences entre les modèles AF, sAF et YRZ dans le formalisme unifié pour les calculs de transport. Pour chaque modèle, $\mathbf{v}_{nk\uparrow} = \mathbf{v}_{nk}$ et $A_{nk\uparrow} = [\hat{A}_{nk}]_{11}$ respectivement donnés aux équations (83) et (85).

	AF	sAF	YRZ
$\xi_{\mathbf{k}}(p) =$	$\xi_{\mathbf{k}} = \text{équation (14)}$	$\xi_{\mathbf{k}} = \text{équation (14)}$	$\xi_{\mathbf{k}}^g(p) = \text{équation (72)}$
$\xi_{\mathbf{k}}^d(p) =$	$\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$	$\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}(p)}$	$\xi_{\mathbf{k}}^0(p) = \text{équation (73)}$
$d_{\mathbf{k}}^\dagger =$	$c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}^\dagger$	$c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}(p),\downarrow}^\dagger$	accessoire
$\mathbf{Q}(p) =$	(π, π)	$(\pi - 2\pi p, \pi)$	aucune
$M_{\mathbf{k}} =$	$12t$	$12t$	$\frac{3}{2}t(\cos(k_x) - \cos(k_y))$
$\mathbf{v}_{nk\downarrow} =$	\mathbf{v}_{nk}	$\mathbf{v}_{n,\mathbf{k}-\mathbf{Q}(p)}$	\mathbf{v}_{nk}
$A_{nk\downarrow} =$	$[\hat{A}_{nk}]_{11}$	$[\hat{A}_{n,\mathbf{k}-\mathbf{Q}(p)}]_{22}$	$[\hat{A}_{nk}]_{11}$
$p =$	équation (88)	équation (88)	équation (90)

où $-e$ est la charge de l'électron, B le champ magnétique en z , V le volume de normalisation, $f(\epsilon) = (e^{\beta\epsilon} + 1)^{-1}$ la distribution de Fermi-Dirac, et $\beta = 1/k_B T$. En général $\sigma_{xy}\sigma_{yx}B^2$ est très petit. Les conductivités σ_{xx} , σ_{yy} et σ_{xy} s'expriment ainsi :

$$\sigma_{ab} = \int d\epsilon \left(-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) \sigma_{ab}(\epsilon), \quad (92)$$

où :

$$\sigma_{xx}(\epsilon) = \frac{e^2 \pi \hbar}{V} \sum_{n\mathbf{k}\sigma} v_{x,n\mathbf{k}\sigma}^2 A_{n\mathbf{k}\sigma}^2(\epsilon), \quad (93)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{yx}(\epsilon) = -\frac{e^3 (\pi \hbar)^2}{3V} \sum_{n\mathbf{k}\sigma} \left[v_{x,n\mathbf{k}\sigma}^2 \frac{\partial v_{y,n\mathbf{k}\sigma}}{\partial k_y} + v_{y,n\mathbf{k}\sigma}^2 \frac{\partial v_{x,n\mathbf{k}\sigma}}{\partial k_x} \right. \\ \left. - 2v_{x,n\mathbf{k}\sigma} v_{y,n\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial v_{x,n\mathbf{k}\sigma}}{\partial k_y} \right] A_{n\mathbf{k}\sigma}^3(\epsilon), \end{aligned} \quad (94)$$

et une expression équivalente à (93) pour σ_{yy} . Ces expressions permettent de traiter n'importe quelle approximation du taux de diffusion via le poids spectral, de même que l'asymétrie x - y retrouvée, par exemple, dans le modèle sAF. L'équation (94) est la version antisymétrique de l'équation (1.25) de la référence [167], correspondant à $(\sigma_H^{yxz} - \sigma_H^{xyz})/2$ dans sa notation. Il faut utiliser la forme antisymétrique comme dans l'expérience, parce que la combinaison de l'asymétrie x - y avec l'approximation de diffusion ℓ -isotrope mène à de légères différences entre σ_H^{yxz} et $-\sigma_H^{xyz}$. Notons aussi que les corrections de vertex sont négligées, que l'intégrale (92) peut être évaluée dans la limite $\lim_{T \rightarrow 0} (-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon}) = \delta(\epsilon)$ et que les expressions de Drude $\sigma_{xx} = e^2 \tau n / m^*$ et $\sigma_{xy} = -e^3 \tau^2 n / m^*$ ne sont retrouvées que dans la limite d'une bande parabolique.

16.2 Chaleur spécifique

La chaleur spécifique du système est la dérivée $C_V = T \frac{\partial S}{\partial T}$ de l'entropie S totale à laquelle chaque état d'énergie ϵ contribue selon :

$$S = k_B \int d\epsilon N(\epsilon) \left[f(\epsilon) \ln f(\epsilon) + (1 - f(\epsilon)) \ln(1 - f(\epsilon)) \right]. \quad (95)$$

La chaleur spécifique électronique [183, 184] est donc pondérée par le poids spectral :

$$C_V = \int d\epsilon \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial T} \frac{\epsilon}{V} \sum_{n\mathbf{k}\sigma} A_{n\mathbf{k}\sigma}(\epsilon). \quad (96)$$

On s'intéresse ici à C_V/T dans la limite $T \rightarrow 0$, que l'on approxime avec $\beta = 500/t$, équivalent à $T = 6\text{K}$ (avec $t = 250\text{ meV}$). Le développement de Sommerfeld [115] permet de montrer que le résultat est alors proportionnel à la densité d'états au niveau de Fermi : $C_V/T = \pi^2 k_B^2 N(0)/3$, ce qui n'est valide que lorsque l'intégrant est non singulier, c'est-à-dire loin du dopage p_{vHS} où se retrouve la singularité de van Hove.

16.3 Coefficient Seebeck

Pour le coefficient Seebeck [185, 176, 177] on calcule :

$$S_x = \frac{1}{-eT} \frac{\int d\epsilon \left(-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) \epsilon \sigma_{xx}(\epsilon)}{\int d\epsilon \left(-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) \sigma_{xx}(\epsilon)}, \quad (97)$$

où $\sigma_{xx}(\omega)$ est donné par (93) et avec une expression équivalente pour S_y , histoire de traiter l'asymétrie x - y du modèle sAF. Encore une fois, on s'intéresse à S_x/T à $T \rightarrow 0$, calculé pour $\beta = 100/t$ cette fois, ce qui équivaut à environ 30K. Une température plus élevée que pour calculer la chaleur spécifique est nécessaire, car l'intégration numérique est plus capricieuse. Le régime linéaire de S_x/T fut tout de même vérifié (sauf proche de p_{vHS}). Les références [176, 185] donnent plus de détails sur cette expression pour S_x .

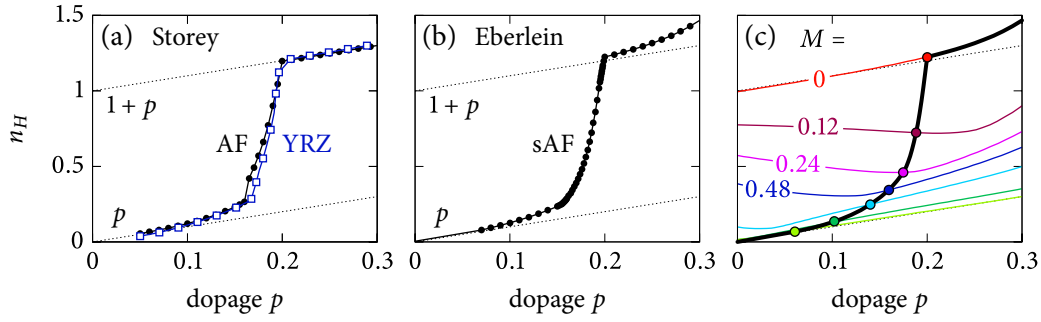


Figure 26. Résultats de Storey et Eberlein pour le nombre de Hall (a) Résultat de Storey [109] pour le champ moyen phénoménologique antiferromagnétique et la théorie YRZ. (b) Résultat d'Eberlein [110] pour le champ moyen phénoménologique antiferromagnétique incommensurable spiral. (c) Prolongement du nombre de Hall à champ moyen M constant autour du point correspondant dans la dépendance phénoménologique $M \propto (0.2 - p)$.

17 Ondes de densité et nombre de Hall

17.1 Succès des modèles AF, sAF et YRZ

Les premiers travaux théoriques parvenus à reproduire le saut de p à $1 + p$ observé expérimentalement dans le nombre de Hall de YBCO [104] sont ceux de Storey [109], et ceux d'Eberlein [110]. Le premier utilise les modèles AF et YRZ pour simuler le pseudogap, le second utilise le modèle sAF. Leurs résultats pour le nombre de Hall sont reproduits à la figure 26 en utilisant précisément les modèles décrits à la section 14. Ces résultats seront revus en détail dans les prochaines sections.

Les modèles AF, sAF et YRZ simulent tous une décroissance du pseudogap en dopage en variant le champ moyen selon $M \propto (p^* - p)$. La figure 26(c) montre les courbes de n_H à champ moyen constant pour le modèle AF. Les points sélectionnés par la variation du champ moyen $M \propto (p^* - p)$ sont mis en évidence. L'idée de faire décroître ainsi le pseudogap vient de la théorie YRZ. La montée rapide du nombre de Hall est entièrement causée par ce choix de $M \propto (p^* - p)$.

À la défense des modèles AF, sAF et YRZ, toutefois, on voit qu'à fort M , la tendance en p est très robuste à faible dopage : il n'y a aucune déviation. C'est là le point fort des modèles AF, sAF et YRZ, et plus généralement, des modèles de type AF. Ce ne sont pas tous les modèles qui garantissent le comportement en p près du demi-remplissage, comme le montre la section qui suit.

17.2 Onde de densité de spin incommensurable colinéaire

Les théories YRZ, antiferromagnétique et antiferromagnétique spirale sont des théories à deux bandes. On sait que, loin du demi-remplissage, les expériences trouvent un vecteur d'onde incommensurable pour l'ordre de spin [186, 187], mais sans spécifier s'il s'agit d'une onde de densité spirale ou colinéaire. Contrairement à l'onde spirale, l'onde colinéaire est représentée par un Hamiltonien $L \times L$; il s'agit donc d'une théorie à L bandes. L'annexe A.4 présente les formules utilisées pour calculer les dérivées premières et secondes des énergies propres dans le cas à plus de deux bandes.

La figure 27 montre les résultats de Charlebois et al. [3] pour le nombre de Hall en fonction du dopage. Elle compare le cas antiferromagnétique à deux bandes au cas d'une onde de densité de spin incommensurable colinéaire de vecteur $\mathbf{Q} = (\pi + \frac{2\pi}{6}, \pi)$, à six bandes. Lorsque le champ moyen augmente, le nombre de Hall passe du résultat attendu pour une bande seule (en noir), à deux fois de suite ce même résultat dans le cas antiferromagnétique (figure 27(a), en rouge), et à six fois de suite ce même résultat pour le cas incommensurable (figure 27(b), en rouge). Cela indique que $\mathbf{Q} = (\pi + \frac{2\pi}{6}, \pi)$ sépare bien la bande en six.

Cette séparation en plusieurs bandes fait que le nombre de Hall de l'onde de densité de spin incommensurable colinéaire tend à s'écarter de la dépendance en p à bas dopage. On le voit pour $\mathbf{Q} = (\pi + \frac{2\pi}{6}, \pi)$ à la figure 27(b), mais il faut comprendre que, pour les vecteurs d'onde à dénominateurs plus élevés, le nombre de bandes augmente. L'accord avec l'expérience est donc compromis.

Charlebois et al. [3] vont plus loin. Avec une séquence de vecteurs \mathbf{Q} bien choisis, ils simulent le comportement observé expérimentalement de $\mathbf{Q} = (\pi \pm \delta, \pi)$ avec $\delta \propto p$ [186, 187]. Le résultat est que le nombre de Hall ne demeure pas accroché à p . On conclut donc que les modèles à deux bandes sont plus plausibles pour expliquer le passage de p à $1 + p$ du nombre de Hall.

17.3 Importance du nombre de bandes

L'impossibilité d'obtenir un nombre de Hall en p robuste dans un modèle d'onde de densité de spin incommensurable colinéaire démontre que, pour expliquer l'expérience, la bande doit être séparée en deux, pas plus. Il s'agit donc d'une force des théories du pseudogap de type AF : elles séparent la zone de Brillouin exactement en deux et c'est ce qui leur permet de reproduire le nombre de Hall observé expérimentalement.

Cependant, cette conclusion suppose que l'interprétation des résultats de Badoux et al.

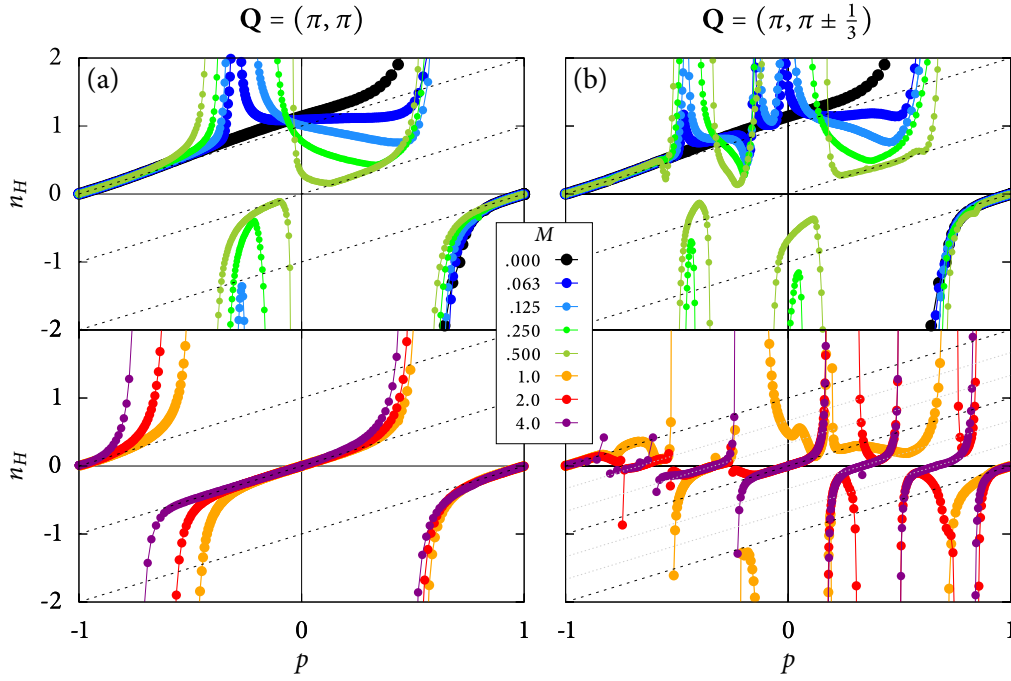


Figure 27. Nombre de Hall pour l'onde de densité de spin incommensurable colinéaire (a) Nombre de Hall en fonction du dopage pour différentes valeurs de champ moyen antiferromagnétique avec $Q = (\pi, \pi)$. Les valeurs du champ moyen sont divisées en deux panneaux afin de clarifier. (b) Même chose pour une onde incommensurable avec $Q = (\pi + \frac{2\pi}{6}, \pi)$, séparant la bande en six. Le dopage en trou p va de -1 à 1 ; à $p = -1$ la bande originale est complètement pleine, à $p = 1$ elle est complètement vide. Figure adaptée de la référence [3]

dans YBCO est correcte [104]. Des résultats précédents, de Balakirev et al. [188], présentent une augmentation similaire du nombre de Hall dans les cuprates à base de Lanthane, mais cette dernière est accompagnée d'une structure piquée avant le retour à $1 + p$. Cette structure est interprétée comme la signature d'un point critique dans l'article. Toutefois, les résultats de Charlebois et al. [3] contiennent exactement ce genre de structures piquées, et ce sont précisément ces structures que l'on interprète comme des écarts au comportement linéaire en p attendu expérimentalement selon Badoux et al. [104]. Bref, le sujet n'est peut-être pas clos.

De plus, les résultats de Morice et al. [113] sur la théorie SU(2) montrent qu'il est possible de reproduire la montée du nombre de Hall avec une théorie de type SC. Donc, bien qu'il s'agisse d'une force des théories de type AF, il ne s'agit pas pour autant d'une faiblesse des théories de type SC. Au contraire, l'expérience de Hall permet probablement de discriminer beaucoup de théories de type SC, alors que presque toutes les théories de type AF garantissent de retrouver le comportement linéaire en p à bas dopage.

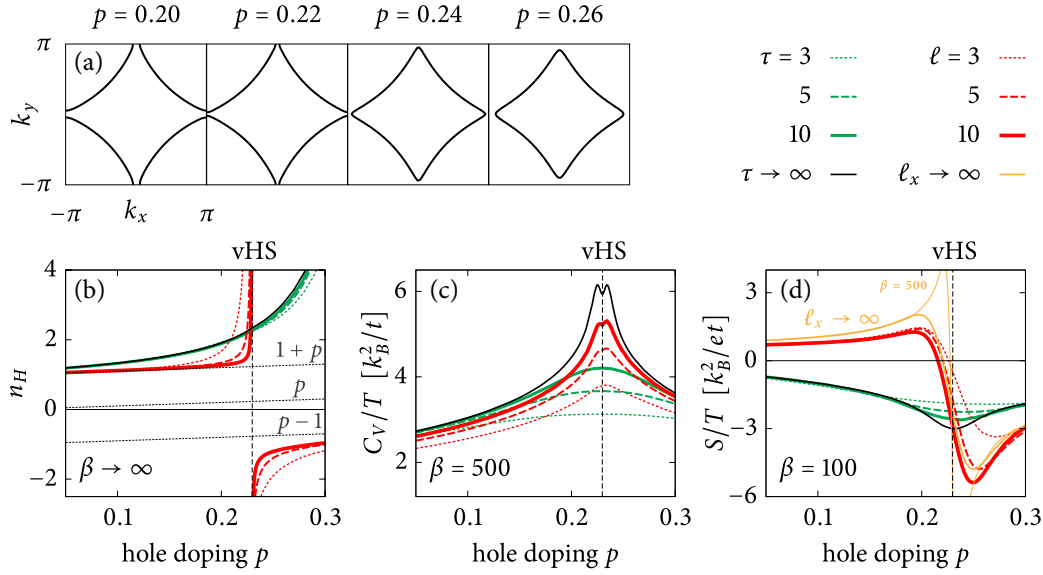


Figure 28. Effets de la singularité de van Hove sur n_H , C_V et S_x (a) surfaces de Fermi aux dopages de part et d'autre de la singularité à $p_{\text{vHS}} = 0.23$ pour les paramètres de bande $(t', t'') = (-0.17, 0.05)$. La surface de Fermi passe d'une grande poche de trous circulaire à une poche d'électrons en diamant à la singularité. (b) Nombre de Hall à $T \rightarrow 0$, (c) chaleur spécifique à $\beta = 500$ et (d) coefficient Seebeck à $\beta = 100$, en fonction du dopage pour l'approximation à temps de vie τ constant (en vert) et celle de libre parcours moyen ℓ_x isotrope (en rouge). Chaque approximation est présentée pour trois valeurs différentes que l'on compare à la limite de diffusion nulle, $\tau \rightarrow \infty$. Le résultat identifié $\ell_x \rightarrow \infty$ correspond à la démarche de Kondo et al. [176], qui consiste à considérer $v_x(\mathbf{k})\tau$ constant pour le simplifier du rapport définissant S_x . La séparation du pic correspondant à la singularité de van Hove dans C_V/T vient de la fonction $\epsilon \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial T}$ dans (96) qui pondère la densité d'états avec deux maxima de part et d'autre du niveau de Fermi à température finie.

18 Prédictions pour la chaleur spécifique et l'effet Seebeck

18.1 Singularité de van Hove et taux de diffusion

Le nombre de Hall n_H n'est pas la seule sonde capable de caractériser la transition observée à p^* . Cette section explore les prédictions des modèles AF, sAF et YRZ pour la chaleur spécifique C_V et pour le coefficient Seebeck S_x .

Pour commencer, il ne faut pas confondre les effets de la transition à p^* avec ceux de la singularité de van Hove. Cette dernière occasionne plusieurs changements dans n_H , C_V et S_x , qui sont illustrés en fonction du dopage à basse température à la figure 28. Les paramètres de bande utilisés donnent une dispersion comparable à celle du LSCO, avec la singularité à $p = 0.23$.

Les effets de la singularité de van Hove dépendent beaucoup de l'approximation utilisée pour le taux de diffusion. La figure 28 compare les approximations de temps de vie τ constant et de libre parcours moyen ℓ -isotrope. L'approximation τ -constant a la propriété de pondérer tous les états \mathbf{k} également dans le poids spectral. Les intégrales de conductivité sont alors déterminées principalement par la variation de la vitesse de groupe $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ à la surface de Fermi. À l'opposé, l'approximation ℓ -isotrope renforce le poids spectral aux états de faibles vitesses, compensant la faiblesse de ces dernières dans les intégrales; les résultats ne dépendent alors que de la topologie de la surface de Fermi.

Cette différence entre τ -constant et ℓ -isotrope a des conséquences pour chacune des quantités n_H , C_V et S_x . Pour n_H , à la figure 28(b), l'approximation τ -constant donne un résultat positif bien au-delà de la singularité de van Hove. Le changement de surface de Fermi, passant d'une grande poche de trous circulaire à une poche d'électrons en diamant (figure 28(a)) n'a donc pas d'impact immédiat, car les états situés aux coins du diamant ont des vitesses trop faibles pour contribuer. Ce comportement du nombre de Hall est d'ailleurs observé expérimentalement [189, 190]. Avec ℓ -isotrope, au contraire, les vitesses sont compensées par le poids spectral et n_H change de signe exactement à la singularité de van Hove, en désaccord avec l'expérience. Pour C_V/T , l'approximation τ -constant arrondit beaucoup le pic de la singularité de van Hove. Pour ℓ -constant, cette dernière reste plutôt bien piquée à cause des faibles vitesses du col qui rendent le poids spectral très étroit à la singularité. Enfin, pour S_x/T , l'approximation τ -constant donne un résultat négatif sur tout le domaine de dopage $0 < p < 0.3$. Pour ℓ -isotrope, S_x/T est plutôt positif pour toute la région sous-dopée, comme dans les expériences [176, 177, 191], et change de signe à la singularité de van Hove.

Ces résultats révèlent un problème des approximations τ -constant et ℓ -isotrope. Dans les expériences [176, 191], le coefficient Seebeck à basse température est positif, ce qui suggère ℓ -isotrope [176, 177], alors que l'effet Hall traverse la singularité de van Hove sans changer de signe, ce qui suggère plutôt τ -constant [189, 190]. Ces incohérences montrent que ni l'une ni l'autre de ces approximations n'est bonne pour les cuprates. Cependant, pour suivre fidèlement les théories de Storey et d'Eberlein pour le nombre de Hall, qui utilisent respectivement ℓ -isotrope et τ -constant, on se contentera de ces dernières. D'autres propositions existent pour le taux de diffusion [181, 192] et elles devraient être privilégiées à l'avenir.

Enfin, comme expliqué à la section 16, le taux de diffusion est introduit via le poids spectral. Cela fait en sorte que n_H , C_V et S_x dépendent non seulement de l'approximation utilisée, mais aussi des valeurs de τ et ℓ . La figure 28 montre que les différences obtenues d'une valeur à l'autre s'amenuisent loin de la singularité de van Hove. Proche de celle-ci,

l'effet d'un τ ou d'un ℓ petit est surtout d'arrondir les changements brusques obtenus à la singularité avec les τ et ℓ plus grands.

18.2 Séparation de p^* et p_e dans le modèle AF

La figure 29 montre les surfaces de Fermi, n_H , C_V/T et S_x/T en fonction du dopage dans le modèle AF de la section 14 pour trois ensembles de paramètres de bande. Principalement, on y voit que la montée de n_H s'accompagne d'une montée de C_V/T et d'une chute de S_x/T . C'est un des résultats principaux de cette thèse.

Pour l'effet Hall et la chaleur spécifique, il n'y a pas de différence notable entre les résultats à τ -constant et à ℓ -isotrope ; ils sont simplement arrondis dans le cas τ -constant. Les autres différences sont celles mentionnées pour la singularité de van Hove. Toutefois, pour l'effet Seebeck, les deux approximations donnent des résultats très différents. Mais comme seule l'approximation ℓ -isotrope procure les valeurs positives observées expérimentalement, on ignore ici les résultats à τ -constant. Une analyse plus complète est disponible dans Verret et al. [2].

Dans les théories phénoménologiques du pseudogap présentées à la section 14, le champ moyen diminue avec le dopage jusqu'à s'annuler à p^* . Règle générale, ce gap se ferme grâce à des pochettes d'électrons qui correspondent au bas de la bande E_k^+ et qui se rapprochent de la bande E_k^- avant de s'y reconnecter à p^* . Les pochettes d'électrons apparaissent donc au niveau de Fermi un peu avant p^* , à un dopage identifié p_e , comme on le voit aux figures 29(a) à 29(c).

Pour le nombre de Hall, alors que p^* marque le retour au comportement en $1 + p$, Storey [109] a bien montré que p_e marque l'amorce de la montée vers $1 + p$. On le voit aux figures 29(d) à 29(f), où la variation des paramètres de bande déplace p_e et change ainsi la largeur de la montée de p à $1 + p$. Pour le voir, il faut ignorer l'augmentation de n_H due à la singularité de van Hove. Bref, pour le nombre de Hall, les deux dopages p_e et p^* ont autant d'importance l'un que l'autre.

Pour la chaleur spécifique, le rôle de p_e est plus important que celui de p^* . En effet, comme on le voit aux figures 29(g) à 29(i), les changements se produisent à p_e et non à p^* . C'est un résultat conséquent avec le fait qu'à température nulle, C_V/T correspond à la densité d'états au niveau de Fermi. Le changement de C_V/T à p_e correspond au gain de densité d'états associée aux pochettes d'électrons arrivant au niveau de Fermi. Comme le gap se referme ensuite progressivement, il n'y a pas d'effet à p^* .

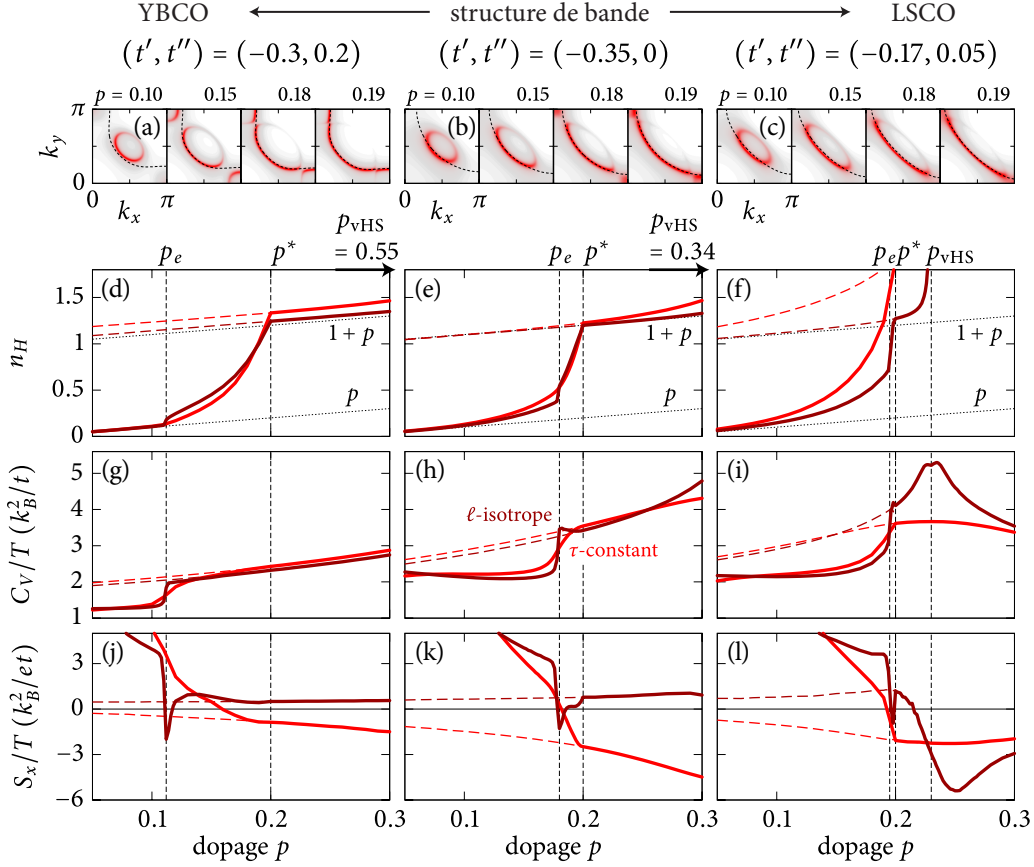


Figure 29. Influence des paramètres de bande sur le transport dans le modèle AF

Les paramètres de bande changent le dopage p_e auquel les pochettes d'électrons apparaissent au niveau de Fermi. (a) Poids spectral à la surface de Fermi pour $(t', t'') = (-0.3, 0.2)$, (b) pour $(t', t'') = (-0.35, 0)$ et (c) pour $(t', t'') = (-0.17, 0.05)$. (d), (e) et (f) nombre de Hall à $T \rightarrow 0$ en fonction du dopage pour les mêmes paramètres de bande, respectivement. (g), (h) et (i) chaleur spécifique à $\beta = 500$ en fonction du dopage pour les mêmes paramètres de bande. (j), (k) et (l) coefficient Seebeck à $\beta = 100$ en fonction du dopage pour les mêmes paramètres de bande. Les lignes rouges sont les résultats à $\tau = 10$ et les lignes foncées sont à $\ell = 20$. Les résultats sans champ moyen sont en pointillés. Les dopages p_e , p^* , et p_{vHS} et les guides à p et à $1 + p$ sont indiqués.

Pour l'effet Seebeck, les rôles de p_e et de p^* sont moins distincts. À la figure 29(j), tous les effets de la transition sont à p_e ; la valeur de S_x/T y chute brusquement sous zéro avant de remonter au résultat sans gap (en pointillé); il n'y a aucune signature à p^* . Toutefois, à la figure 29(k), l'intervalle $p_e < p < p^*$ en entier contient des variations, ce qui montre que p^* a aussi son importance. Enfin, à la figure 29(l), p_e est trop près de p^* pour distinguer leurs effets.

Enfin, il existe une relation entre la position de p_e et celle de la singularité de van Hove :

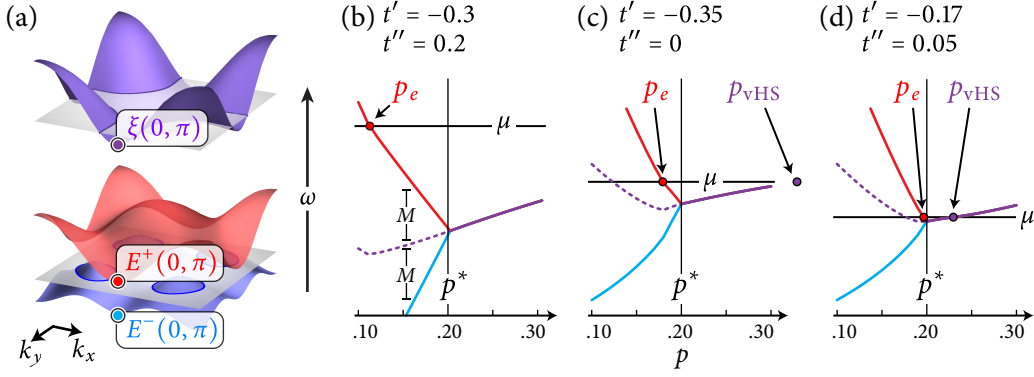


Figure 30. Explication de la relation entre p_e , p^* et p_{vHS} (a) Identification des points importants $\xi(0, \pi)$ en violet, $E^+(0, \pi)$ en rouge et $E^-(0, \pi)$ en bleu. (b) Énergie de ces trois points en fonction du dopage, identifiés par les mêmes couleurs. Les paramètres de bande présentés sont $(t', t'') = (-0.3, 0.2)$, (c) pour $(t', t'') = (-0.35, 0)$, et (d) pour $(t', t'') = (-0.17, 0.05)$. Le niveau de Fermi μ correspond toujours à $\omega = 0$ puisque notre notation est $\xi(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu$, ce sont donc les bandes qui bougent avec le dopage. Les valeurs de μ et p utilisées sont celles pour $M \neq 0$, et donc sous p^* , $\xi(0, \pi)$ n'est qu'un guide indiquant la position du centre du gap. Le dopage p_{vHS} est là où le col $\xi(0, \pi)$ se retrouve au niveau de Fermi, c'est-à-dire $\mu = \xi(0, \pi)$. Aux dopages environnants, p_{vHS} est donc un bon indicateur que l'écart entre μ et le col $\xi(0, \pi)$ est faible. Cela s'exprime au premier ordre comme $\mu - \xi(0, \pi) \propto p_{vHS} - p$. Or, les pochettes d'électrons apparaissent lorsque $\mu - E^+(0, \pi) = 0$, et au point $(0, \pi)$, la valeur propre se simplifie à $E^+(\mathbf{k}) = \xi(\mathbf{k}) + M$, donc les pochettes apparaissent à $\mu - \xi(0, \pi) = M$. De plus, par définition, le gap décroît comme $M \propto (p^* - p)$. Au dopage p_e , on a donc $p_{vHS} - p_e \propto (p^* - p_e)$. Bref, une singularité de van Hove près de p^* indique une séparation $\mu - \xi(0, \pi)$ plus petite, et donc une séparation $p^* - p_e$ plus petite.

plus p_{vHS} s'approche de p^* par la droite, plus p_e se rapproche de p^* par la gauche. En effet, les pochettes d'électrons se forment aux antinœuds $(\pi, 0)$ et $(0, \pi)$ de la dispersion originale, là où se trouve le col causant la singularité de van Hove. Ainsi, plus la surface de Fermi originale s'approche de $(\pi, 0)$, plus les poches d'électrons sont petites et plus elles disparaissent rapidement avec le gap. Une explication plus détaillée est donnée à la figure 30.

18.3 Comparaison des modèles AF, sAF et YRZ

La figure 31 montre n_H , C_V/T et S_x/T en fonction du dopage à basse température pour le modèle AF, le modèle sAF et la théorie YRZ. Les résultats des trois modèles sont similaires et toutes les observations relatives à la séparation de p_e et p^* sont aussi valides pour le modèle sAF et la théorie YRZ.

Quelques différences entre les modèles sont dignes de mention, mais peu importantes.

La première a trait à l'effet Hall dans le modèle sAF dans l'approximation ℓ -isotrope. On voit à la figure 31(e) que n_H dévie substantiellement de la montée à τ -constant (courbe verte foncée). Cette déviation vient d'un σ_{xy} affaibli par les pochettes d'électrons particulières du modèle sAF. Ces dernières ayant de faibles vitesses, elles ne contribuent significativement que dans l'approximation ℓ -isotrope. Cela a peu d'importance, car l'approximation ℓ -isotrope est contre-indiquée pour calculer n_H . La deuxième différence a trait à la chaleur spécifique de la théorie YRZ. La figure 31(i) présente une décroissance de C_V/T en dopage pour la bande sans gap (courbe pointillée bleu pâle), plutôt que l'augmentation des deux autres modèles. Cela vient des facteurs de Gutzwiller (voir section 14.4) qui aplatissent la bande à faible dopage, augmentant donc la densité d'états. C'est un résultat sans conséquence pour la présente analyse, car il n'a rien à voir avec le pseudogap introduit à p^* . La troisième différence concerne l'effet Seebeck dans le modèle sAF avec l'approximation τ -constant. La figure 31(k) montre que S_x a un minimum entre p_e et p^* plutôt que le simple changement de pente des deux autres modèles. Encore une fois cela n'a pas d'importance, car pour S_x , c'est l'approximation τ -constant qui est contre-indiquée. Cependant, ce dernier résultat est lié aux différences plus importantes explorées ci-dessous.

Certaines différences entre les résultats AF, sAF et YRZ sont significatives, car elles permettraient de discriminer ces modèles à partir des données expérimentales. Elles concernent l'effet Seebeck dans l'approximation ℓ -isotrope. Aux figures 29(j) à (l) et 31(j) à (l), on voit que la gamme de dopage $p_e < p < p^*$ présente des caractéristiques uniques à chaque modèle. Dans le modèle AF, S_x n'est négatif que sur un domaine très étroit. Les modèles sAF et YRZ ont plutôt des S_x négatifs sur presque toute la gamme $p_e < p < p^*$. Toutefois, le modèle sAF se démarque par des variations marquées de S_x sur cette gamme de dopage, alors que la théorie YRZ présente une courbe arrondie, à cause de l'aplatissement dû aux facteurs de Gutzwiller. Bref, l'effet Seebeck est plus sensible aux détails du gap s'ouvrant à p^* .

19 Récapitulatif

Pour résumer, les modèles AF, sAF et la théorie YRZ prédisent tous une augmentation de C_V/T et une chute de S_x/T accompagnant la montée déjà observée expérimentalement pour n_H . À la section 17.2, le modèle d'onde de densité de spin incommensurable colinéaire montrait l'importance d'une séparation en deux bandes dans ces modèles, pas plus, pour reproduire l'augmentation de n_H . Cependant, lorsque le gap n'est pas fixé au niveau de Fermi, cette séparation en deux bandes nécessite des pochettes d'électrons au niveau de Fermi pour fermer le gap en douceur à p^* . L'augmentation rapide de C_V/T et la chute de S_x/T devraient apparaître non à p^* , mais au dopage p_e plus faible, où ces pochettes d'électrons apparaissent à la surface de Fermi. D'un point de vue qualitatif, la seule sonde

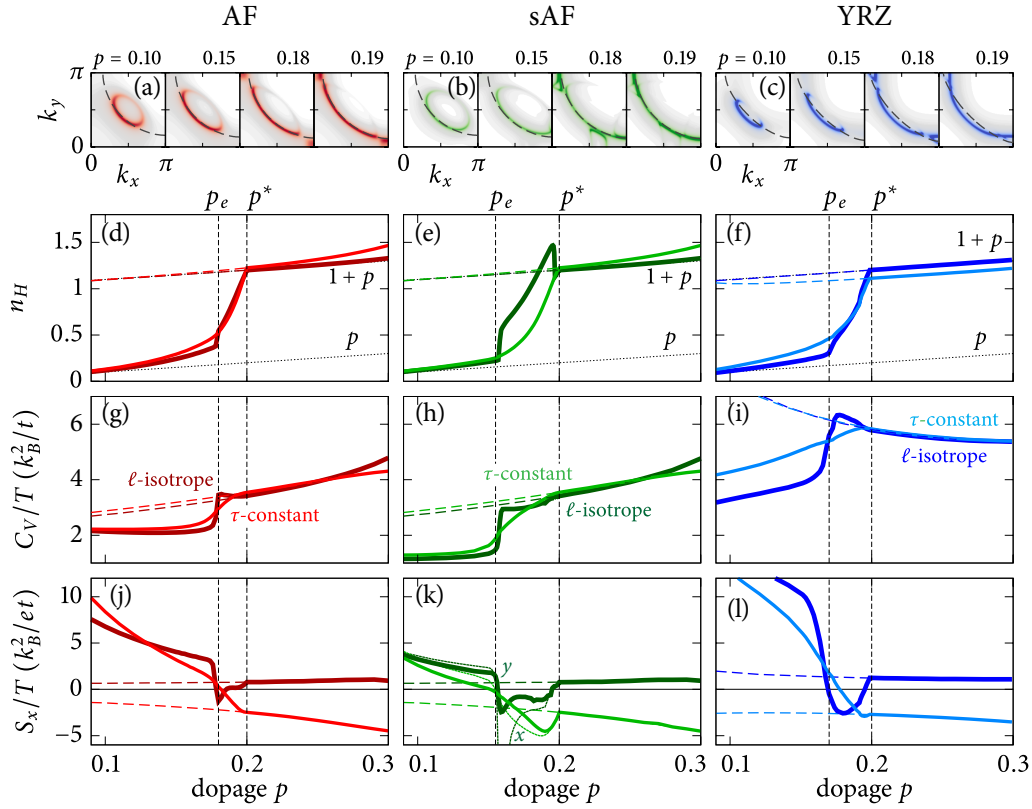


Figure 31. Comparaison des résultats de transport dans les modèles AF sAF et YRZ (a) Poids spectral au niveau de Fermi pour le modèle AF avec $(t', t'') = (-0.35, 0)$, (b) pour le modèle sAF avec $(t', t'') = (-0.35, 0)$, et (c) dans la théorie YRZ avec les paramètres $(t', t'') = (-0.3, 0.2)$ différents, mais qui mènent à une surface de Fermi comparable puisqu'ils sont modifiés par les facteurs de Gutzwiller (voir section 14.4). (d) Nombre de Hall à température nulle ($\beta \rightarrow \infty$) en fonction du dopage dans le modèle AF, (e) dans le modèle sAF, et (f) dans la théorie YRZ. Ces trois derniers reproduisent les résultats de Storey [109] et Eberlein [110]. (g) Chaleur spécifique à $\beta = 500$ en fonction du dopage pour le modèle AF, (h) pour le modèle sAF, et (i) dans la théorie YRZ. (j) Coefficient Seebeck à $\beta = 100$ dans le modèle AF, (k) dans le modèle sAF, pour lequel les résultats en x et en y apparaissent, et (l) dans la théorie YRZ. Les approximations τ -constant (pâle) et ℓ -isotope (foncé) sont identifiées, ainsi que les guides à p et $1 + p$ pour l'effet Hall et les positions de p_e et p^* .

étudiée capable de discriminer les trois modèles les uns des autres est l'effet Seebeck. Les résultats discriminants n'apparaissent toutefois qu'aux dopages où l'on retrouve les pochettes d'électrons, entre p_e et p^* . Or, cette plage de dopage est réduite lorsque la singularité de van Hove est à proximité de p^* , comme il fut démontré en utilisant plusieurs paramètres de bande dans le modèle AF. Tous les composés ne pourront donc pas fournir des preuves équivalentes de cette séparation entre p_e et p^* . Par exemple, le composé LSCO, connu pour sa singularité de van Hove très proche de p^* , n'est probablement pas un bon candidat. Les composés à base de mercure ou de thallium sont de meilleures options.

CONCLUSION

Pour conclure, rappelons les résultats importants de cette thèse en répondant clairement aux questions énoncées à la section 5.

Est-ce que les ondes de densité de charge observées expérimentalement (d FF-DW) peuvent causer le pseudogap dans la densité d'états? À la section 11, nous avons répondu à la première question grâce aux champs moyens d'une onde de densité à une dimension et de l'ordre d FF-DW, avec les vecteurs d'onde $Q = \frac{3}{10}2\pi$, et $\frac{2\pi}{3}$. Il fut déterminé que tous les gaps d'onde de densité apparaissent à des valeurs fixes de \mathbf{k} , et donc que pour une valeur de \mathbf{Q} donnée, un gap complet ne se forme au niveau de Fermi qu'à un remplissage donné. Pour un gap partiel, c'est-à-dire un gap correspondant aux extrémités de bandes qui se chevauchent, la position en énergie dépend fortement des paramètres de bande, et le gap est asymétrique. Néanmoins, complets ou partiels, les gaps d'ondes de densité n'apparaissent au niveau de Fermi que s'il y a emboîtement, sans quoi le gap apparaîtrait extrêmement asymétrique par rapport au niveau de Fermi. Bref, puisque la condition d'emboîtement fut écartée par l'expérience et que le gap observé en STM est toujours centré au niveau de Fermi, nous concluons que dans l'approximation champ-moyen, le pseudogap ne s'explique pas avec les ordres d FF-DW et s' PDW observés expérimentalement.

Est-ce que les ordres d FF-DW ou s' PDW peuvent expliquer les sous-structures du gap supraconducteur observées en STM? À la section 12, nous avons répondu à la deuxième question grâce aux champs moyens des ordres d FF-DW et s' PDW aux vecteurs d'onde $Q = \frac{2\pi}{4}$, et $\frac{3}{10}2\pi$, et $\frac{2\pi}{3}$ en coexistence avec ceux de la supraconductivité de type d et de l'antiferromagnétisme. Des sous-structures causées par les ondes de densité apparaissent dans le gap supraconducteur, et elles sont très semblables à celles des expériences, en particulier pour l'onde de densité de paires s' PDW. Cela n'est toutefois valide que dans un gap de type SC; nous avons montré qu'un gap de type AF en coexistence avec les ondes de densité et la supraconductivité donne un spectre substantiellement différent de celui observé expérimentalement. En combinaison avec le fait que les ondes de densité et les sous-structures sont observées ensemble en STM, nous concluons que les ondes de densité sont les candidats de choix pour expliquer ces sous-structures dans un gap supraconducteur ou un pseudogap de type SC, plutôt que d'expliquer le pseudogap lui-même.

Est-ce qu'une onde de densité de spin incommensurable colinéaire peut expliquer l'augmentation rapide du nombre de Hall aussi bien que les modèles AF, sAF et YRZ? À la section 17, nous avons répondu à la troisième question grâce au champ moyen de l'onde de densité incommensurable colinéaire au vecteur d'onde $\mathbf{Q} = (\pi + \frac{2\pi}{6}, \pi)$. Ce modèle mène à six énergies propres non dégénérées. Selon l'amplitude du champ moyen, cette séparation fait que le nombre de Hall décroche de son comportement en p , ce qui est en désaccord avec les résultats expérimentaux. Nous concluons donc que dans les théories du pseudogap de type AF, il est essentiel de séparer la bande en deux seulement pour reproduire correctement le comportement en p du nombre de Hall à bas dopage.

Quelles sont les prédictions des modèles AF, sAF et YRZ pour l'effet Seebeck et la chaleur spécifique? À la section 18 nous avons obtenu les prédictions recherchées pour les modèles AF, sAF et YRZ. Ces modèles prédisent tous une augmentation de C_V/T et une chute de S_x/T lorsque p augmente, en plus de l'augmentation de n_H déjà étudiée dans la littérature. La position de ces signatures en dopage est fortement influencée par le dopage p_e où les pochettes d'électrons apparaissent à la surface de Fermi dans ces modèles, et on a montré que la position de ce dopage est déterminée par l'écart entre p^* et la singularité de van Hove à p_{vHS} . Parmi nos prédictions, seules celles de l'effet Seebeck permettraient de discriminer les modèles les uns des autres.

Qu'y a-t-il à apprendre de tous ces résultats? À notre connaissance, les pochettes d'électrons retrouvées dans les modèles AF, sAF et YRZ n'ont jamais été observées expérimentalement. Il est donc fort probable que nos prédictions pour les modèles AF, sAF et YRZ s'avèrent erronées. Or, la plupart des théories du pseudogap de type AF—celles basées sur un anti-croisement qui n'est pas fixé au niveau de Fermi—ont besoin de telles pochettes additionnelles pour fermer le gap et rétablir la surface de Fermi complète à p^* . Ce serait donc un coup dur pour ces théories si la séparation entre p_e et p^* n'existait pas dans les cuprates. Une avenue pour réconcilier la théorie et l'expérience serait alors de retirer artificiellement les pochettes d'électrons du modèle, soit en augmentant le taux de diffusion sur celle-ci (ce serait le cas avec les taux de diffusions de la référence [181]), soit en négligeant simplement la bande E_k^+ sous p^* . Toutefois, nos résultats pour les sous-structures causées par les ondes de densité ne s'accordent pas non plus avec l'expérience pour ce type de théorie. Bref, les théories du pseudogap de type AF, bien qu'elles expliquent l'augmentation du nombre de Hall, prédisent des pochettes d'électrons qui n'ont jamais été observées, et elles sont incompatibles avec les sous-structures du gap causées par les ondes de densité. La suite naturelle des choses est donc de se demander ce qui en est pour les théories de type SC—celles dotées d'un gap symétrique particule-trou fixée au niveau de Fermi. En effet, ces dernières n'ont pas de pochette d'électrons, et on a montré qu'elles sont compatibles avec

les sous-structures causées par des ondes de densité. La question restante est à savoir si elles peuvent reproduire l'augmentation du nombre de Hall, et il se trouve que la théorie $SU(2)$, dont le pseudogap est de type SC, y est parvenue récemment [113]. En regardant vers l'avenir, permettons-nous donc une suggestion : celle d'obtenir les prédictions de la théorie $SU(2)$ pour le coefficient Seebeck dans les mêmes conditions que pour l'effet Hall. Un succès dans cette prédiction serait déterminant pour les théories de type anti-croisement ; il réaffirmerait la pertinence des théories de type SC pour interpréter le pseudogap. Autrement, on constaterait que les modèles phénoménologiques sont particulièrement difficiles à réconcilier avec l'expérience. Il faudrait alors peut-être se rendre à l'évidence et retourner au modèle de Hubbard. Du moins, en attendant d'avoir plus d'imagination.

ANNEXES

A.1 Représentation de Bloch

A.1.1 Normalisation

La normalisation utilisée pour les ondes planes est la suivante :

$$\langle \mathbf{s} | \mathbf{q} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{s}} \quad (\text{A.1})$$

où \mathbf{s} est une position en deux dimensions dans un volume carré V . Les conditions aux limites périodiques font que les vecteurs d'onde \mathbf{q} ont les composantes discrètes $q_\alpha = \frac{2\pi n_\alpha}{\sqrt{V}}$, où les n_α sont des entiers non bornés associés aux directions $\alpha \in \{x, y\}$. La limite $V \rightarrow \infty$ est sous-entendue à la fin des calculs et mène à un espace continu pour les vecteurs \mathbf{q} .

Pour travailler dans un cristal, on décompose l'espace sur un réseau de Bravais, constitué de N vecteurs \mathbf{r} . La position \mathbf{s} s'exprime alors comme :

$$\mathbf{s} = \mathbf{x} + \mathbf{r}, \quad (\text{A.2})$$

avec \mathbf{x} restreint à la maille élémentaire de volume v . Le volume total peut donc s'exprimer $V = Nv$. Les vecteurs d'onde \mathbf{q} , pour leur part, peuvent être décomposés sur le réseau réciproque, constitué d'une infinité de vecteurs \mathbf{G} définis de sorte que $\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} \in 2\pi\mathbb{Z}$. Le vecteur \mathbf{q} est donc :

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{G}, \quad (\text{A.3})$$

où \mathbf{k} est un des N vecteurs contenus dans la zone de Brillouin—la maille élémentaire du réseau réciproque. La normalisation (A.1) s'exprime alors comme :

$$\langle \mathbf{r} + \mathbf{x} | \mathbf{k} + \mathbf{G} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{v}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}} \quad \text{avec } e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} = 1. \quad (\text{A.4})$$

A.1.2 Base des fonctions de Bloch

Dans la représentation $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ menant à la matrice de la section 6.1, le potentiel cristallin couple tous les états d'un même \mathbf{k} , de sorte que ce dernier demeure un bon nombre quantique. Toutefois, l'état propre résultant est une superposition des différents \mathbf{G} [116] :

$$|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \sqrt{N} \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \psi_n \rangle. \quad (\text{A.5})$$

Le facteur \sqrt{N} sera nécessaire pour une bonne normalisation, autrement on peut le considérer comme faisant partie des coefficients $\langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \psi_n \rangle$. Dans la représentation spatiale des positions $|\mathbf{s}\rangle = |\mathbf{r} + \mathbf{x}\rangle$, avec la normalisation (A.4) on a donc :

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{s}) = \langle \mathbf{s} | \sqrt{N} \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \psi_n \rangle \quad (\text{A.6})$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \left[\frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \psi_n \rangle \right] \quad (\text{A.7})$$

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (\text{A.8})$$

Ce qui constitue le théorème de Bloch, avec les fonctions :

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \equiv e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (\text{A.9})$$

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \psi_n \rangle. \quad (\text{A.10})$$

Or, en rappelant la définition de la fonction de Wannier :

$$w_{n\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (\text{A.11})$$

et en la mettant en parallèle avec les deux fonctions précédentes :

$$w_{n\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \psi_n \rangle \quad (\text{A.12})$$

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \psi_n \rangle \quad (\text{A.13})$$

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \psi_n \rangle, \quad (\text{A.14})$$

on voit que les trois fonctions sont simplement des étapes différentes d'une transformée de Fourier complète. On peut le rendre très explicite avec la propriété $w_{n\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = w_n(\mathbf{x} - \mathbf{r})$ de

la fonction de Wannier et en insérant $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} = 1$ dans la somme :

$$w_n(\mathbf{x} + \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot(\mathbf{x}+\mathbf{r})} \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \psi_n \rangle \quad (\text{A.15})$$

$$w_n(\mathbf{s}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{s}} \langle \mathbf{q} | \psi_n \rangle \quad (\text{A.16})$$

$$= \langle \mathbf{s} | \psi_n \rangle, \quad (\text{A.17})$$

À ne pas confondre avec $\langle \mathbf{s} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle$ exprimé en (A.6). La différence est très subtile : elle vient du fait que $\sqrt{N} \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle \langle \mathbf{k} + \mathbf{G}|$ n'est qu'un projecteur sur certains états $|\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle$ et non l'identité, qui est plutôt $\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle \langle \mathbf{k} + \mathbf{G}|$. Une façon originale de voir les choses est alors de définir une base hybride, à la fois dans l'espace des positions \mathbf{x} et dans l'espace des \mathbf{k} , et s'exprimant à partir de $|\mathbf{s}\rangle$ ou de $|\mathbf{q}\rangle$ comme :

$$|\mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\mathbf{r} + \mathbf{x}\rangle \quad (\text{A.18})$$

$$|\mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle, \quad (\text{A.19})$$

où \mathbf{k} est restreint à la zone de Brillouin et \mathbf{x} est restreint à la maille élémentaire du réseau. Il s'agit d'une base complète ; on montre aisément $\int d\mathbf{x} \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{k}, \mathbf{x}| = \int d\mathbf{s} |\mathbf{s}\rangle \langle \mathbf{s}|$. Elle permet de retrouver $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ dans la forme (A.13) en multipliant $|\psi_n\rangle$ par (A.19) de la gauche :

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{k}, \mathbf{x} | \psi_n \rangle \quad (\text{A.20})$$

Il y a toutefois une liberté dans la définition de cette base. Le facteur de phase $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ de l'équation (A.19) peut être déplacé pour définir plutôt (notons l'ordre différent de \mathbf{x} et \mathbf{k}) :

$$|\mathbf{x}, \mathbf{k}\rangle \equiv e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\mathbf{r} + \mathbf{x}\rangle \quad (\text{A.21})$$

$$|\mathbf{x}, \mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle, \quad (\text{A.22})$$

C'est alors la fonction $u_{n\mathbf{k}}$ dans la forme (A.14) que l'on obtient en multipliant $|\psi_n\rangle$ par (A.22) :

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{k} | \psi_n \rangle \quad (\text{A.23})$$

La relation entre les deux bases est :

$$|\mathbf{x}, \mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle \quad (\text{A.24})$$

On peut aussi montrer que les propriétés des fonctions $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ et $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (\text{A.25})$$

$$\psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{x}) = \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (\text{A.26})$$

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (\text{A.27})$$

$$u_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{x}) = e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (\text{A.28})$$

sont des propriétés de ces bases :

$$|\mathbf{k}, \mathbf{x} + \mathbf{r}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle, \quad (\text{A.29})$$

$$|\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{x}\rangle = |\mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle, \quad (\text{A.30})$$

$$|\mathbf{x} + \mathbf{r}, \mathbf{k}\rangle = |\mathbf{x}, \mathbf{k}\rangle, \quad (\text{A.31})$$

$$|\mathbf{x}, \mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle = e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{x}, \mathbf{k}\rangle. \quad (\text{A.32})$$

On a d'ailleurs choisi la notation $|\mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle$ et $|\mathbf{x}, \mathbf{k}\rangle$ de sorte que la première variable soit celle dans laquelle la base est périodique. Enfin, en mettant toutes les bases en parallèle :

$$|\mathbf{s}\rangle = |\mathbf{r} + \mathbf{x}\rangle, \quad (\text{A.33})$$

$$|\mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\mathbf{r} + \mathbf{x}\rangle, \quad (\text{A.34})$$

$$|\mathbf{x}, \mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\mathbf{r} + \mathbf{x}\rangle, \quad (\text{A.35})$$

$$|\mathbf{q}\rangle = |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle = \frac{1}{\sqrt{v}} \int d^2x e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\mathbf{r} + \mathbf{x}\rangle, \quad (\text{A.36})$$

et dans l'autre sens :

$$|\mathbf{s}\rangle = |\mathbf{r} + \mathbf{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle, \quad (\text{A.37})$$

$$|\mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle, \quad (\text{A.38})$$

$$|\mathbf{x}, \mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{v}} \sum_{\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle, \quad (\text{A.39})$$

$$|\mathbf{q}\rangle = |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle. \quad (\text{A.40})$$

On voit que, du point de vue de la phase accumulée dans la transformée de Fourier, la base $|\mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle$ est plus proche de la base $|\mathbf{s}\rangle$ alors que la base $|\mathbf{x}, \mathbf{k}\rangle$ est plus proche de $|\mathbf{q}\rangle$.

A.2 Réseau et super-réseau

A.2.1 Idée générale

Pour traiter les ordres brisant la périodicité originale du réseau, il faut décomposer les vecteurs \mathbf{r} sur un super-réseau :

$$\mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}, \quad (\text{A.41})$$

où $\tilde{\mathbf{r}}$ fait partie des $\frac{N}{L}$ vecteurs du super-réseau et \mathbf{R} est le reste (dans l'amas), correspondant à un vecteur du réseau original. La figure A.1 illustre cette décomposition pour un réseau carré, et l'annexe A.2.3 donne la procédure mathématique pour l'effectuer rigoureusement. Les vecteurs \mathbf{R} sont aussi appelés vecteurs d'amas, car ils forment un amas de L sites dans la maille élémentaire du super-réseau. Comme il existe plusieurs géométries possibles pour la maille élémentaire, il existe plusieurs géométries possibles pour l'amas d'un super-réseau donné.

Le super-réseau vient avec un super-réseau réciproque formé des vecteurs \mathbf{K} , définis pour que $\mathbf{K} \cdot \tilde{\mathbf{r}} = 2\pi n$ avec n entier. On peut donc décomposer le vecteur \mathbf{k} de la zone de Brillouin originale comme :

$$\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}, \quad (\text{A.42})$$

où $\tilde{\mathbf{k}}$ est le reste dans la zone de Brillouin réduite (rBZ, *reduced Brillouin zone*), c'est-à-dire la maille élémentaire du super-réseau réciproque. De plus, on restreint les vecteurs \mathbf{K} à la zone de Brillouin originale, puisque ceux l'excédant peuvent être écrits comme $\mathbf{G} + \mathbf{K}$, où \mathbf{G} est un vecteur du réseau réciproque original (voir figure A.1). Cette restriction fait qu'il y a autant de vecteurs \mathbf{K} que de vecteurs \mathbf{R} .

A.2.2 Définitions

Pour exprimer ces deux décompositions formellement, il faut d'abord définir le réseau et le super-réseau. Le réseau γ a les vecteurs de base \mathbf{a}_i , permettant d'exprimer la position \mathbf{r} d'un site du réseau comme :

$$\mathbf{r} = \sum_i r_i \mathbf{a}_i \quad r_i \text{ entiers} \quad (\text{A.43})$$

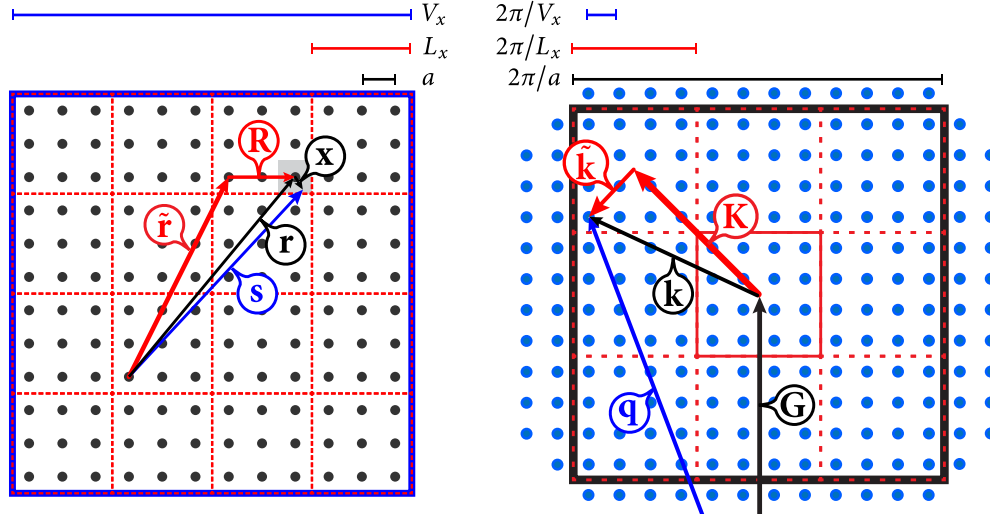


Figure A.1. Réseau, super-réseau, réseau réciproque et super-réseau réciproque. L'espace direct est présenté à gauche, et l'espace réciproque à droite. Les trois représentations $\mathbf{s} \leftrightarrow \mathbf{q}$, $\mathbf{r} + \mathbf{x} \leftrightarrow \mathbf{k} + \mathbf{G}$, et $\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R} \leftrightarrow \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$ sont respectivement illustrées en bleu, noir, et rouge. En bleu : le grand carré bleu délimite l'espace de volume $V_x \times V_y = 144a^2$ pour les positions continues \mathbf{s} . Les fonctions d'ondes dans cet espace sont périodiques, de sorte que leurs composantes de Fourier sont discrètes, aux vecteurs d'ondes \mathbf{q} formant le réseau de points bleus espacés de $2\pi/L_x$ et $2\pi/L_y$ dans l'espace réciproque. En noir : les points noirs séparés par a sont les positions associées aux vecteurs \mathbf{r} du réseau de Bravais. Le reste dans la maille élémentaire est noté \mathbf{x} . Comme ces vecteurs sont discrets, les vecteurs d'onde \mathbf{k} correspondants sont bornés à l'espace périodique de la zone de Brillouin, délimité par le grand carré noir, de volume $\frac{2\pi}{a} \times \frac{2\pi}{a}$. Cette dernière se répète à tous les vecteurs \mathbf{G} du réseau réciproque. En rouge : le réseau est aussi divisé en amas de $L_x \times L_x = 9$ sites séparés par des lignes rouges pointillées à gauche. Les positions $\tilde{\mathbf{r}}$ de ces amas forment le super-réseau. La positions d'un site de l'amas est identifié par \mathbf{R} . Les vecteurs d'ondes $\tilde{\mathbf{k}}$ sont contraints au volume périodique de la zone de Brillouin réduite, délimité par le carré rouge à droite, et qui se répète à tous les vecteurs \mathbf{K} du super-réseau réciproque. On contraint aussi les vecteurs \mathbf{K} à la zone de Brillouin originale, puisque ceux l'excédant peuvent être écrits $\mathbf{G} + \mathbf{K}$.

Les vecteurs de base \mathbf{b}_j du réseau réciproque, eux, sont définis par la condition $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$, permettant d'exprimer les vecteurs \mathbf{k} de la première zone de Brillouin comme :

$$\mathbf{k} = \sum_j \frac{m_j}{N_j} \mathbf{b}_j \quad m_j \in \{0, 1, \dots, N_j - 1\}. \quad (\text{A.44})$$

Pour sa part, le super-réseau Γ a les vecteurs de base $\tilde{\mathbf{a}}_i$, définis à partir des vecteurs de base \mathbf{a}_i du réseau original comme :

$$\tilde{\mathbf{a}}_i = \sum_j L_{ij} \mathbf{a}_j, \quad \text{avec } L_{ij} \text{ entiers.} \quad (\text{A.45})$$

Les L_{ij} , forment la matrice \hat{L} encodant le nombre entier de chaque \mathbf{a}_j contenu dans chaque $\tilde{\mathbf{a}}_i$. Cette matrice sera diagonale si les $\tilde{\mathbf{a}}_i$ sont dans les mêmes directions que les \mathbf{a}_j , comme c'est le cas pour la décomposition rectangulaire discutée à la section 10.5. Le volume de la maille élémentaire du super-réseau \tilde{v} est plus grand que celui de la maille élémentaire originale v par :

$$\tilde{v} = Lv, \quad (\text{A.46})$$

où $L = |\hat{L}|$ est le déterminant de la matrice \hat{L} , c'est-à-dire le nombre de sites dans l'amas. La condition $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ permet de montrer que dans l'espace réciproque, la relation est renversée : ce sont les \mathbf{b}_i qui sont multiple entiers des $\tilde{\mathbf{b}}_i$ définis par $\tilde{\mathbf{a}}_i \cdot \tilde{\mathbf{b}}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Cela est dicté par la matrice transposée \hat{L}^\top :

$$\mathbf{b}_i = \sum_j L_{ji} \tilde{\mathbf{b}}_j. \quad (\text{A.47})$$

Ce renversement a un fondement intuitif. Si la maille du super-réseau est plus grande que celle du réseau, alors c'est l'inverse dans l'espace réciproque : la maille du super-réseau réciproque est plus petite que celle du réseau réciproque. Pour le réseau γ , le super-réseau Γ , et leurs réseaux réciproques respectifs, on a d'ailleurs les relations :

$$\Gamma \subset \gamma, \quad (\text{A.48})$$

$$\gamma^* \subset \Gamma^*. \quad (\text{A.49})$$

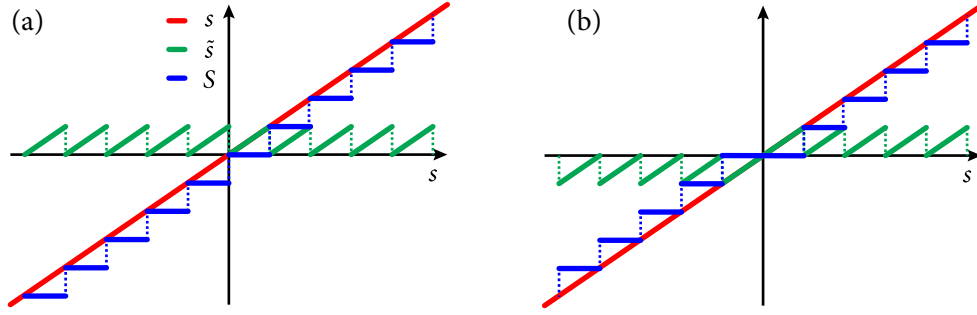


Figure A.2. Exemples de deux conventions pour le modulo à diviseur positif (a) Convention euclidienne (utilisée dans cette thèse) (b) Convention tronquée.

A.2.3 Décomposition des vecteurs

Tout nombre peut-être exprimé en base L . Par exemple, le chiffre exprimé 14 en base $L = 10$, c'est-à-dire $1(\times 10) + 4(\times 1)$, s'exprime aussi en base $L = 4$ comme 32, c'est-à-dire $3(\times 4) + 2(\times 1)$. Cela correspond à décomposer le nombre s en sa partie entière en L , qu'on notera \tilde{s} et le reste associé, noté S :

$$s = \tilde{s} + S \quad \text{avec :} \quad \tilde{s} = \lfloor s \div L \rfloor L \quad (\text{A.50})$$

$$S = (s \bmod L). \quad (\text{A.51})$$

Toutefois, cette décomposition n'est pas unique, car la définition du modulo n'est pas unique. La convention euclidienne, préférée ici, est représentée à la figure A.2(a).

Ce qui suit présente l'opération analogue pour des vecteurs. La division et le modulo trouvent leurs analogues vectoriels dans la règle Cramer, et l'ambiguïté venant de la liberté du modulo trouve le sien dans l'ambiguïté du choix de l'amas. On commence par exprimer la décomposition dans les deux bases vectorielles ; celle des \mathbf{a}_i et celle des $\tilde{\mathbf{a}}_i$. Il suffit d'insérer la relation (A.45) où nécessaire :

$$\mathbf{r} = \sum_j r_j \mathbf{a}_j = \underbrace{\sum_i \tilde{r}_i \tilde{\mathbf{a}}_i}_{\equiv \tilde{\mathbf{r}}} + \underbrace{\sum_j R_j \mathbf{a}_j}_{\equiv \mathbf{R}} \quad r_j, \tilde{r}_i, R_j \text{ entiers} \quad (\text{A.52})$$

$$= \sum_j \left(\sum_i \tilde{r}_i L_{ij} + R_j \right) \mathbf{a}_j \quad (\text{A.53})$$

$$= \sum_i \underbrace{\left(\tilde{r}_i + \sum_j R_j [\hat{L}^{-1}]_{ji} \right)}_{\equiv \alpha_i} \tilde{\mathbf{a}}_i \equiv \sum_i \alpha_i \tilde{\mathbf{a}}_i \quad \alpha_i \text{ pas néss. entiers.} \quad (\text{A.54})$$

En pratique, pour déterminer $\tilde{\mathbf{r}}$ et \mathbf{R} à partir d'un \mathbf{r} connu, il suffit de déterminer les α_i . Pour ce faire, les lignes (A.52) et (A.54), avec la relation (A.45), permettent d'écrire le système d'équations suivant :

$$r_j = \sum_i \alpha_i L_{ij} \quad \rightarrow \quad \mathbf{r} = \hat{\mathbf{L}}^\top \boldsymbol{\alpha} \quad \rightarrow \quad \alpha_i = \frac{|\hat{L}_i^\top(\mathbf{r})|}{|\hat{\mathbf{L}}|}, \quad (\text{A.55})$$

dont la solution pour les α_i est donnée par la règle de Cramer, exprimée en termes de $\hat{L}_i^\top(\mathbf{r})$, qui est la matrice $\hat{\mathbf{L}}^\top$ à laquelle on a substitué la i -ième colonne par les éléments du vecteur \mathbf{r} .

Une fois les α_i connus, chacun peut être séparé en une partie entière \tilde{r}_i et un reste. Cette procédure n'est pas unique, dû à l'ambiguïté pour le modulo en une dimension. Les R_i peuvent donc prendre n'importe quelle valeur, la seule contrainte est qu'ils soient contenus dans un volume équivalent à celui d'une maille élémentaire du super-réseau. Cette liberté pour les R_i correspond à la liberté de géométrie de l'amas.

La convention la plus simple est de borner les R_i pour que $\tilde{r}_i = \lfloor \alpha_i \rfloor$. On voit par l'équation (A.54) que cette convention correspond à choisir les \mathbf{R}_i pour que $\sum_j R_j [L^{-1}]_{ji} = (\alpha_i \bmod 1)$, avec la convention euclidienne pour le modulo. En deux dimensions, cela correspond à choisir un amas contenu dans le parallélogramme dont les côtés sont les vecteurs de base du super-réseau. Le résultat peut s'exprimer de sorte à ne faire intervenir que des nombres entiers :

$$\mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R} \quad \text{avec :} \quad \tilde{\mathbf{r}} = \sum_{ij} \left\lfloor \frac{|\hat{L}_i^\top(\mathbf{r})|}{|\hat{\mathbf{L}}|} \right\rfloor L_{ij} \mathbf{a}_j \quad (\text{A.56})$$

$$\mathbf{R} = \sum_{ij} \frac{|\hat{L}_i^\top(\mathbf{r})| \bmod |\hat{\mathbf{L}}|}{|\hat{\mathbf{L}}|} L_{ij} \mathbf{a}_j. \quad (\text{A.57})$$

Remarquons que l'équation (A.56) constitue alors une forme de division entière d'un vecteur par une matrice ⁴ et (A.57) une forme de modulo vectoriel [193].

Les vecteurs d'ondes $\tilde{\mathbf{k}}$ associés au super-réseau s'expriment comme :

$$\tilde{\mathbf{k}} = \sum_i \frac{\tilde{m}_i}{\tilde{N}_i} \tilde{\mathbf{b}}_i \quad \tilde{m}_i \in \{0, 1, \dots, \tilde{N}_i - 1\}, \quad (\text{A.58})$$

Les $\tilde{\mathbf{k}}$ sont alors bornées à la zone de Brillouin du super-réseau ; la zone de Brillouin réduite. Les $\tilde{\mathbf{k}}$ ne peuplent donc qu'une fraction de l'espace occupé par les \mathbf{k} originaux ; ils forment un «amas» de $\tilde{\mathbf{k}}$ parmi les \mathbf{k} . Cet amas est tout à fait analogue à l'amas des \mathbf{R} parmi les \mathbf{r} et

4. La division d'un vecteur par une matrice n'est pas définie en général, car le problème de Cramer n'a pas de solution pour toutes les matrices.

la décomposition pour les \mathbf{k} est donc inversée par rapport à celle de (A.56-A.57) :

$$\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K} \quad \text{avec :} \quad \tilde{\mathbf{k}} = \sum_{ij} \frac{|\hat{L}_i| \bmod |\hat{L}|}{|\hat{L}|} L_{ji} \mathbf{b}_j, \quad (\text{A.59})$$

$$\mathbf{K} = \sum_{ij} \left\lfloor \frac{|\hat{L}_i|}{|\hat{L}|} \right\rfloor L_{ji} \mathbf{b}_j. \quad (\text{A.60})$$

Notons enfin qu'on peut effectuer les décompositions $\mathbf{s} = \mathbf{r} + \mathbf{x}$ et $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ de la section A.1.1 de la même manière en exprimant les vecteurs de base du réseau original à partir d'une base vectorielle \mathbf{e}_α :

$$\mathbf{a}_i = \sum_{\alpha} A_{i\alpha} \mathbf{e}_\alpha, \quad (\text{A.61})$$

ce qui permet d'exprimer les vecteurs \mathbf{r} comme :

$$\mathbf{r} = \sum_{i,\alpha} r_i A_{i\alpha} \mathbf{e}_\alpha. \quad (\text{A.62})$$

Il suffit alors de substituer :

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{s} \quad \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{q} \quad (\text{A.63})$$

$$\hat{L} \rightarrow \hat{A} \quad \text{avec :} \quad \tilde{\mathbf{r}} \rightarrow \mathbf{r} \quad \tilde{\mathbf{k}} \rightarrow \mathbf{k} \quad (\text{A.64})$$

$$\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{x} \quad \mathbf{G} \rightarrow \mathbf{K} \quad (\text{A.65})$$

dans les décompositions (A.56-A.57) et (A.59-A.60). Les nombres intervenant ne seront alors pas tous entiers, puisque \mathbf{s} et \mathbf{x} sont des vecteurs du continuum.

A.2.4 Représentation mixte ($\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}}$) en seconde quantification

Les analogues aux représentations de Bloch $|\mathbf{x}, \mathbf{k}\rangle$ et $|\mathbf{k}, \mathbf{x}\rangle$ de la section A.1.2 pourraient être notés $|\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}}\rangle$ et $|\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{R}\rangle$. Toutefois, les présenter en notation de Dirac serait redondant, les voici donc plutôt en seconde quantification, suivant un ordre d'idées différent.

Une représentation mixte ($\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}}$) s'obtient en ne sommant qu'un sous-ensemble des positions ou des vecteurs d'ondes de la transformée de Fourier. En laissant le spin implicite pour simplifier, considérons par exemple la transformée de Fourier de $c_{\mathbf{r}}$ en décomposant \mathbf{r}

selon (A.56-A.57) et \mathbf{k} selon (A.59-A.60) :

$$c_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}} \quad \begin{array}{l} \mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R} \\ \mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K} \\ e^{i\mathbf{K} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} = 1 \end{array} \quad (\text{A.66})$$

$$= \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \left[e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{R}} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} c_{\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}} \right]. \quad (\text{A.67})$$

Cette séparation permet de définir l'objet entre crochets comme $c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}})$:

$$c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}}) \equiv e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{R}} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} c_{\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}}, \quad (\text{A.68})$$

qui permet d'exprimer (A.67) et sa réciproque comme :

$$c_{\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}} = \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}}). \quad (\text{A.69})$$

$$c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}}) = \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} c_{\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}}, \quad (\text{A.70})$$

Considérons maintenant la même décomposition pour $c_{\mathbf{k}}$:

$$c_{\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{r}} \quad \begin{array}{l} \mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R} \\ e^{i\mathbf{K} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} = 1 \end{array} \quad (\text{A.71})$$

$$= \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \left[\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{R}} c_{\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}} \right]. \quad (\text{A.72})$$

On voit alors qu'il est impossible de définir un objet $c_{\mathbf{K}}(\tilde{\mathbf{r}})$ analogue à $c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}})$, car une dépendance en $\tilde{\mathbf{k}}$ demeure sous la somme en \mathbf{R} entre crochets. Cette asymétrie entre (A.72) et (A.67) est due au fait que $e^{i\mathbf{K} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} = 1$ alors que $e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{R}} \neq 1$. Intéressons-nous donc plutôt à l'ordre de sommation suivant :

$$= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \left[e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{R}} \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} c_{\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}} \right], \quad (\text{A.73})$$

qui révèle une ambiguïté dans notre choix de $c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}})$. Comme on le voit ici, l'objet entre crochet dans (A.73) est un candidat tout aussi naturel que celui dans le crochet de (A.67). Nous le définirons comme $c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}})$:

$$c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}}) \equiv e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{R}} \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} c_{\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}}, \quad (\text{A.74})$$

Il permet d'exprimer (A.75) et sa réciproque comme :

$$c_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (\text{A.75})$$

$$c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} c_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}}. \quad (\text{A.76})$$

La comparaison des définitions (A.68) et (A.74) nous donne la relation

$$c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}}) = e^{i\tilde{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{R}} c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}}). \quad (\text{A.77})$$

Comme on vient de voir, l'ambiguïté est mathématique. Le choix est analogue à celui d'utiliser les $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ ou les $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ dans la théorie de Bloch, et comme ces dernières ont les propriétés (A.25) à (A.28) on peut démontrer les propriétés analogues pour $c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}})$ et $c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}})$:

Propriétés de $c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}})$:

1. $c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}})$ est défini en $\tilde{\mathbf{k}}$ modulo \mathbf{K} (sous-entendant le modulo établi en (A.60)). On le voit directement de l'expression (A.70) :

$$c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}) = \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{-i(\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K})\cdot\tilde{\mathbf{r}}} c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R}} \quad e^{i\mathbf{K}\cdot\tilde{\mathbf{r}}} = 1 \quad (\text{A.78})$$

$$= c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}}). \quad (\text{A.79})$$

Notons que cela correspond à une condition de périodicité en $\tilde{\mathbf{k}}$.

2. $c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}})$ est défini en \mathbf{R} à une phase $e^{i\tilde{\mathbf{k}}\cdot\tilde{\mathbf{r}}}$ près (sous-entendant la décomposition (A.56-A.57)). On le voit de la définition (A.68) :

$$c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}}) = e^{i\tilde{\mathbf{k}}\cdot(\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R})} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot(\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R})} c_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}} \quad e^{i\mathbf{K}\cdot\tilde{\mathbf{r}}} = 1 \quad (\text{A.80})$$

$$= e^{i\tilde{\mathbf{k}}\cdot\tilde{\mathbf{r}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{R}} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} c_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}} \quad (\text{A.81})$$

$$= e^{i\tilde{\mathbf{k}}\cdot\tilde{\mathbf{r}}} c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}}). \quad (\text{A.82})$$

Propriétés de $c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}})$:

1. $c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}})$ est défini en \mathbf{R} modulo $\tilde{\mathbf{r}}$ (sous-entendant maintenant le modulo établi en (A.57)).
On le voit directement de l'expression (A.76) :

$$c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot (\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R})} c_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}} \quad e^{i\mathbf{K} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} = 1 \quad (\text{A.83})$$

$$= c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (\text{A.84})$$

et notons que cela correspond à une condition de périodicité en \mathbf{R} .

2. $c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}})$ est défini en $\tilde{\mathbf{k}}$ à une phase $e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}$ près (sous-entendant la décomposition (A.59-A.60)). On le voit de la définition (A.74) :

$$c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}) = e^{-i(\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}) \cdot \mathbf{R}} \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{-i(\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}) \cdot \tilde{\mathbf{r}}} c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R}} \quad e^{i\mathbf{K} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} = 1 \quad (\text{A.85})$$

$$= e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{R}} \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R}} \quad (\text{A.86})$$

$$= e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}}). \quad (\text{A.87})$$

Périodisation et relocalisation Pour que notre compréhension de la représentation mixte soit complète, il ne reste que deux relations à établir : celle permettant d'exprimer $c_{\mathbf{k}}$ à partir de $c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}})$ et celle permettant d'exprimer $c_{\tilde{\mathbf{r}}}$ à partir de $c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}})$. Pour retrouver $c_{\mathbf{k}}$ à partir de $c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}})$, on peut reprendre (A.73) et la propriété (A.79) :

$$c_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{R}} \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R}} \quad (\text{A.88})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i(\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}) \cdot \mathbf{R}} c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (\text{A.89})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i(\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}) \cdot \mathbf{R}} c_{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}) \quad (\text{A.90})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} c_{\mathbf{R}}(\mathbf{k}), \quad (\text{A.91})$$

où le vecteur \mathbf{k} est un vecteur de la zone de Brillouin originale. Pour exprimer $c_{\mathbf{r}}$ à partir de $c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}})$ on peut prendre (A.67) et la propriété (A.84) :

$$c_{\mathbf{r}} = \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{R}} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} c_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}} \quad (\text{A.92})$$

$$= \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot (\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R})} c_{\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (\text{A.93})$$

$$= \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot (\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R})} c_{\tilde{\mathbf{r}}+\mathbf{R}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (\text{A.94})$$

$$= \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{N}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{r}}^{(2)}(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (\text{A.95})$$

où le vecteur \mathbf{r} est un vecteur du réseau original.

A.3 Utilisation du hamiltonien général pour ondes de densité

A.3.1 Autres conventions

Cette annexe est dédiée aux différentes formes que peut prendre l'hamiltonien (42) :

$$H = \sum_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} + \sum_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} \Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} + \text{c.h.} \quad (\text{A.96})$$

La convention choisie dans cette thèse est :

$$H_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\text{sauts}} \equiv e^{i\phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}} \sum_{\mathbf{r},\sigma} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\sigma} e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r} + \frac{\mathbf{a}}{2})} c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r},\sigma} \quad (\text{A.97})$$

$$= e^{i\phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\sigma} e^{-i(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2}) \cdot \mathbf{a}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (\text{A.98})$$

$$H_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\text{paires}} \equiv e^{i\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}} \sum_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r} + \frac{\mathbf{a}}{2})} (c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\uparrow} c_{\mathbf{r},\downarrow} - c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\downarrow} c_{\mathbf{r},\uparrow}) \quad (\text{A.99})$$

$$= e^{i\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} \cos\left(\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2}\right) \cdot \mathbf{a}\right) c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow}, \quad (\text{A.100})$$

mais d'autres conventions existent. Le matériel supplémentaire de la référence [72] donne une revue détaillée des différentes conventions utilisées dans la littérature.

Un exemple de convention différente consiste à incorporer le facteur $\mathbf{Q} \cdot \frac{\mathbf{a}}{2}$ dans les phases $\phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}$ et $\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}$. À phase nulle, les maxima de l'onde de densité (partie réelle du facteur de forme) sont alors aux sites \mathbf{r} plutôt qu'à $(\mathbf{r} + \mathbf{a})/2$ (sur le lien). Notons cette convention

B :

$$\phi_{\mathbf{Q}\mathbf{a}}^{\text{B}} = \phi_{\mathbf{Q}\mathbf{a}} + \mathbf{Q} \cdot \frac{\mathbf{a}}{2} \quad \phi_{\mathbf{Q}\mathbf{a}} = \phi_{\mathbf{Q}\mathbf{a}}^{\text{B}} - \mathbf{Q} \cdot \frac{\mathbf{a}}{2} \quad (\text{A.101})$$

$$\theta_{\mathbf{Q}\mathbf{a}}^{\text{B}} = \theta_{\mathbf{Q}\mathbf{a}} + \mathbf{Q} \cdot \frac{\mathbf{a}}{2} \quad \theta_{\mathbf{Q}\mathbf{a}} = \theta_{\mathbf{Q}\mathbf{a}}^{\text{B}} - \mathbf{Q} \cdot \frac{\mathbf{a}}{2} \quad (\text{A.102})$$

Cela donne, pour les deux termes dans les représentations \mathbf{r} et \mathbf{k} :

$$H_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\text{sauts,B}} = e^{i\phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\text{B}}} \sum_{\mathbf{r},\sigma} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r},\sigma} \quad (\text{A.103})$$

$$= e^{i\phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\text{B}}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (\text{A.104})$$

$$H_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\text{paires,B}} = e^{i\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\text{B}}} \sum_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} (c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\uparrow} c_{\mathbf{r},\downarrow} - c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\downarrow} c_{\mathbf{r},\uparrow}) \quad (\text{A.105})$$

$$= e^{i\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\text{B}}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} + e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{a}}) c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow}. \quad (\text{A.106})$$

Un autre exemple de convention différente est de prendre les mêmes phases que la convention B, mais d'utiliser la forme $c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}+\mathbf{a}}$ plutôt que $c_{\mathbf{r}+\mathbf{a}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}}$ pour définir le $t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}$. Appelons cette convention D :

$$t_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}} = t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^* \quad t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} = t_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}*} \quad (\text{A.107})$$

$$\mathbf{Q}^{\text{D}} = -\mathbf{Q} \quad \mathbf{Q} = -\mathbf{Q}^{\text{D}} \quad (\text{A.108})$$

$$\phi_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}} = -(\phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} + \mathbf{Q} \cdot \frac{\mathbf{a}}{2}) \quad \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} = -(\phi_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}} - \mathbf{Q}^{\text{D}} \cdot \frac{\mathbf{a}}{2}) \quad (\text{A.109})$$

$$\theta_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}} = \theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} + \mathbf{Q} \cdot \frac{\mathbf{a}}{2} \quad \theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} = \theta_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}} - \mathbf{Q}^{\text{D}} \cdot \frac{\mathbf{a}}{2} \quad (\text{A.110})$$

Cela donne, pour les deux termes dans les représentations \mathbf{r} et \mathbf{k} :

$$H_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{sauts,D}} = e^{i\phi_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}}} \sum_{\mathbf{r},\sigma} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}} e^{i\mathbf{Q}^{\text{D}} \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{r},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\sigma} \quad (\text{A.111})$$

$$= e^{i\phi_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}^{\text{D}},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (\text{A.112})$$

$$H_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\text{paires,D}} = e^{i\theta_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}}} \sum_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}} e^{i\mathbf{Q}^{\text{D}} \cdot \mathbf{r}} (c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\uparrow} c_{\mathbf{r},\downarrow} - c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\downarrow} c_{\mathbf{r},\uparrow}) \quad (\text{A.113})$$

$$= e^{i\theta_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}}^{\text{D}}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Delta_{\mathbf{Q}^{\text{D}},\mathbf{a}} (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} + e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{a}}) c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow}. \quad (\text{A.114})$$

A.3.2 Exemple 1D de la forme matricielle

À titre d'exemple, considérons l'hamiltonien (A.96) en une dimension pour $Q = \frac{2\pi}{3}$. D'abord, tout comme la relation de dispersion ξ_k combine tous les sauts possibles :

$$\xi_k \equiv \sum_a e^{ika} t_a, \quad (\text{A.115})$$

on définit ici Δ_k , $t_{Q,k}$, $\Delta_{Q,k}$, combinant respectivement tous les termes d'appariement homogène, tous les termes d'onde de densité, et tous les termes d'ondes de densité de paires, toujours pour $Q = \frac{2\pi}{3}$ seulement :

$$\Delta_k \equiv \sum_a e^{ika} \Delta_a \quad (\text{A.116})$$

$$t_{Qk} \equiv \sum_a e^{i(k+\frac{Q}{2})a} t_{Q,a} \quad (\text{A.117})$$

$$\Delta_{Qk} \equiv \sum_a e^{i(k+\frac{Q}{2})a} \Delta_{Q,a}. \quad (\text{A.118})$$

L'hamiltonien s'écrit donc :

$$H^{1D} = \sum_{k,\sigma} \xi_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \left(\sum_{k,\sigma} t_{Q,k} c_{k+Q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \right. \quad (\text{A.119})$$

$$\left. + \sum_k \Delta_k c_{k,\uparrow} c_{-k,\downarrow} + \sum_k \Delta_{Q,k} c_{k,\uparrow} c_{-(k+Q),\downarrow} + \text{c.h.} \right). \quad (\text{A.120})$$

L'objectif consiste alors à le mettre dans la forme matricielle suivante :

$$H^{1D} = \sum_{k \in \text{rBZ}} \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow}^\dagger & \cdots & c_{-k,\downarrow} & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k & \cdots & \Delta_k^* & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \\ \Delta_k & \cdots & -\xi_{-k} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ \vdots \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (\text{A.121})$$

Partie normale spin up Pour clarifier cet objectif, considérons la partie normale du hamiltonien, c'est-à-dire sans terme d'appariement, et limitons-nous aux termes spin up :

$$H_{\uparrow}^{\text{ID}} = \sum_k \left(\xi_k c_{k,\uparrow}^{\dagger} c_{k,\uparrow} + t_{Q,k} c_{k+Q,\uparrow}^{\dagger} c_{k,\uparrow} + t_{Q,k}^* c_{k,\uparrow}^{\dagger} c_{k+Q,\uparrow} \right). \quad (\text{A.122})$$

On restreint la somme à la zone de Brillouin réduite $-\frac{Q}{2} < k < \frac{Q}{2}$, occupant un tiers de la zone de Brillouin originale $-\pi < k \leq \pi$, ce qui nécessite d'écrire chaque terme trois fois :

$$\begin{aligned} = & \sum_{k \in \text{rBZ}} \left(\xi_k c_{k,\uparrow}^{\dagger} c_{k,\uparrow} + t_{Q,k} c_{k+Q,\uparrow}^{\dagger} c_{k,\uparrow} + t_{Q,k}^* c_{k,\uparrow}^{\dagger} c_{k+Q,\uparrow} \right. \\ & + \xi_{k+Q} c_{k+Q,\uparrow}^{\dagger} c_{k+Q,\uparrow} + t_{Q,k+Q} c_{k+2Q,\uparrow}^{\dagger} c_{k+Q,\uparrow} + t_{Q,k+Q}^* c_{k+Q,\uparrow}^{\dagger} c_{k+2Q,\uparrow} \\ & \left. + \xi_{k+2Q} c_{k+2Q,\uparrow}^{\dagger} c_{k+2Q,\uparrow} + t_{Q,k+2Q} c_{k+3Q,\uparrow}^{\dagger} c_{k+2Q,\uparrow} + t_{Q,k+2Q}^* c_{k+2Q,\uparrow}^{\dagger} c_{k+3Q,\uparrow} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.123})$$

La périodicité des états de Bloch dans la zone de Brillouin originale fait que $c_{k+3Q,\sigma} = c_{k,\sigma}$ de sorte que l'hamiltonien s'écrit aussi sous forme matricielle :

$$= \sum_{k \in \text{rBZ}} \left(c_{k,\uparrow}^{\dagger} c_{k+Q,\uparrow}^{\dagger} c_{k+2Q,\uparrow}^{\dagger} \right) \begin{pmatrix} \xi_k & t_{Q,k}^* & t_{Q,k+2Q} \\ t_{Q,k} & \xi_{k+Q} & t_{Q,k+Q}^* \\ t_{Q,k+2Q}^* & t_{Q,k+Q} & \xi_{k+2Q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow} \\ c_{k+Q,\uparrow} \\ c_{k+2Q,\uparrow} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.124})$$

C'est précisément le bloc $\begin{pmatrix} \xi_k & \cdots \\ \vdots & \ddots \end{pmatrix}$ recherché dans (A.121). Il ne reste qu'à écrire une forme analogue pour les parties anormales et spin down. Commençons par la partie anormale, car elle indiquera quels opérateurs forment la partie spin down du vecteur de Nambu.

Partie anormale La partie anormale ne comprend que les termes d'appariement :

$$H_{\text{an}}^{\text{ID}} = \sum_k \left(\Delta_k c_{k,\uparrow} c_{-k,\downarrow} + \Delta_k^* c_{-k,\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow}^\dagger + \Delta_{Q,k} c_{k,\uparrow} c_{-(k+Q),\downarrow} + \Delta_{Q,k}^* c_{-(k+Q),\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow}^\dagger \right) \quad (\text{A.125})$$

$$= \sum_{k \in \text{rBZ}} \left(\Delta_k c_{k,\uparrow} c_{-k,\downarrow} + \Delta_k^* c_{-k,\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow}^\dagger + \Delta_{Q,k} c_{k,\uparrow} c_{-(k+Q),\downarrow} + \Delta_{Q,k}^* c_{-(k+Q),\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow}^\dagger \right. \\ + \Delta_{k+Q} c_{k+Q,\uparrow} c_{-(k+Q),\downarrow} + \Delta_{k+Q}^* c_{-(k+Q),\downarrow}^\dagger c_{k+Q,\uparrow}^\dagger \\ + \Delta_{Q,k+Q} c_{k+Q,\uparrow} c_{-(k+2Q),\downarrow} + \Delta_{Q,k+Q}^* c_{-(k+2Q),\downarrow}^\dagger c_{k+Q,\uparrow}^\dagger \\ + \Delta_{k+2Q} c_{k+2Q,\uparrow} c_{-(k+2Q),\downarrow} + \Delta_{k+2Q}^* c_{-(k+2Q),\downarrow}^\dagger c_{k+2Q,\uparrow}^\dagger \\ \left. + \Delta_{Q,k+2Q} c_{k+2Q,\uparrow} c_{-(k+3Q),\downarrow} + \Delta_{Q,k+2Q}^* c_{-(k+3Q),\downarrow}^\dagger c_{k+2Q,\uparrow}^\dagger \right) \quad (\text{A.126})$$

$$= \sum_{k \in \text{rBZ}} \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow}^\dagger & c_{k+Q,\uparrow}^\dagger & c_{k+2Q,\uparrow}^\dagger & c_{-k,\downarrow} & c_{-(k+Q),\downarrow} & c_{-(k+2Q),\downarrow} \end{pmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\Delta_k^* & -\Delta_{Q,k}^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_{k+Q}^* & -\Delta_{Q,k+Q}^* \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta_{Q,k+2Q}^* & 0 & -\Delta_{k+2Q}^* \\ -\Delta_k & 0 & -\Delta_{Q,k+2Q} & 0 & 0 & 0 \\ -\Delta_{Q,k} & -\Delta_{k+Q} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_{Q,k+Q} & -\Delta_{k+2Q} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow} \\ c_{k+Q,\uparrow} \\ c_{k+2Q,\uparrow} \\ c_{-k,\downarrow}^\dagger \\ c_{-(k+Q),\downarrow}^\dagger \\ c_{-(k+2Q),\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{A.127})$$

Et il s'agit des blocs hors-diagonaux $\begin{pmatrix} -\Delta_k^* & \cdots \\ \vdots & \ddots \end{pmatrix}$ et $\begin{pmatrix} -\Delta_k & \cdots \\ \vdots & \ddots \end{pmatrix}$ de (A.121). Notons qu'un terme d'onde de paires de vecteur d'onde $-Q$ occuperait les places restées libres dans ces blocs hors diagonaux.

Partie normale spin down La partie spin down ne peut être écrite directement de (A.124), car avant d'avoir diagonalisé l'hamiltonien, les sommes $\sum_k (\cdots)_k \neq \sum_k (\cdots)_{-k}$ ne sont équivalentes que pour la zone de Brillouin originale, non la zone de Brillouin réduite. Il faut donc refaire les étapes :

$$H_{\downarrow}^{\text{ID}} = \sum_k \left(\xi_{-k} c_{-k,\downarrow}^\dagger c_{-k,\downarrow} + t_{Q,-k} c_{-k+Q,\downarrow}^\dagger c_{-k,\downarrow} + t_{Q,-k}^* c_{-k,\downarrow}^\dagger c_{-k+Q,\downarrow} \right) \quad (\text{A.128})$$

$$= \sum_{k \in \text{rBZ}} \left(\xi_{-k} c_{-k,\downarrow}^\dagger c_{k,\downarrow} + t_{Q,-k} c_{-k+Q,\downarrow}^\dagger c_{-k,\downarrow} + t_{Q,-k}^* c_{-k,\downarrow}^\dagger c_{-k+Q,\downarrow} + \xi_{k+Q} c_{-(k+Q),\downarrow}^\dagger c_{-(k+Q),\downarrow} \right. \\ + t_{Q,-(k+Q)} c_{-k,\downarrow}^\dagger c_{-(k+Q),\downarrow} + t_{Q,-(k+Q)}^* c_{-(k+Q),\downarrow}^\dagger c_{-k,\downarrow} + \xi_{-(k+2Q)} c_{-(k+2Q),\downarrow}^\dagger c_{-(k+2Q),\downarrow} \\ \left. + t_{Q,-(k+2Q)} c_{-(k+Q),\downarrow}^\dagger c_{-(k+2Q),\downarrow} + t_{Q,-(k+2Q)}^* c_{-(k+2Q),\downarrow}^\dagger c_{-(k+Q),\downarrow} \right), \quad (\text{A.129})$$

remarquant que $c_{-k+Q,\sigma} = c_{-(k+2Q),\sigma}$, on peut écrire :

$$= \sum_{k \in \text{BZ}} \begin{pmatrix} c_{-k,\downarrow} & c_{-(k+Q),\downarrow} & c_{-(k+2Q),\downarrow} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -\xi_{-k} & -t_{Q,-(k+Q)}^* & -t_{Q,-k} \\ -t_{Q,-(k+Q)} & -\xi_{-(k+Q)} & -t_{Q,-(k+2Q)}^* \\ -t_{Q,-k}^* & -t_{Q,-(k+2Q)} & -\xi_{-(k+2Q)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{-k,\downarrow}^\dagger \\ c_{-(k+Q),\downarrow}^\dagger \\ c_{-(k+2Q),\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{A.130})$$

Et il s'agit du bloc diagonal $\begin{pmatrix} -\xi_{-k} & \cdots \\ \vdots & \ddots \end{pmatrix}$ recherché dans (A.121).

Hamiltonien complet Finalement, en combinant (A.124), (A.130) et (A.127), on obtient l'hamiltonien complet sous forme matricielle :

$$H^{\text{1D}} = \sum_{k \in \text{RBZ}} \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow}^\dagger & c_{k+Q,\uparrow}^\dagger & c_{k+2Q,\uparrow}^\dagger & c_{-k,\downarrow} & c_{-(k+Q),\downarrow} & c_{-(k+2Q),\downarrow} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \xi_k & t_{Q,k}^* & t_{Q,k+2Q} & -\Delta_k^* & -\Delta_{Q,k}^* & 0 \\ t_{Q,k} & \xi_{k+Q} & t_{Q,k+Q}^* & 0 & -\Delta_{k+Q}^* & -\Delta_{Q,k+Q}^* \\ t_{Q,k+2Q}^* & t_{Q,k+Q} & \xi_{k+2Q} & -\Delta_{Q,k+2Q}^* & 0 & -\Delta_{k+2Q}^* \\ -\Delta_k & 0 & -\Delta_{Q,k+2Q} & -\xi_{-k} & -t_{Q,-(k+Q)}^* & -t_{Q,-k} \\ -\Delta_{Q,k} & -\Delta_{k+Q} & 0 & -t_{Q,-(k+Q)} & -\xi_{k+Q} & -t_{Q,-(k+2Q)}^* \\ 0 & -\Delta_{Q,k+Q} & -\Delta_{k+2Q} & -t_{Q,-k}^* & -t_{Q,-(k+2Q)} & -\xi_{k+2Q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow} \\ c_{k+Q,\uparrow} \\ c_{k+2Q,\uparrow} \\ c_{-k,\downarrow}^\dagger \\ c_{-(k+Q),\downarrow}^\dagger \\ c_{-(k+2Q),\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{A.131})$$

A.3.3 Représentation (K,K') générale

Pour généraliser l'approche de la section précédente, on cherche à écrire l'hamiltonien comme :

$$H = \sum_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} \begin{pmatrix} c_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K},\uparrow}^\dagger & c_{-(\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}),\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [\hat{t}_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} & 0 \\ [\hat{\Delta}_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} & [\hat{t}_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\downarrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}',\uparrow} \\ c_{-(\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}'),\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \text{c.h.} \quad (\text{A.132})$$

où le produit matriciel est en notation indicelle pour chacun des blocs. Cela permet de régler la question pour les matrices de toute dimension.

Partie normale spin-up Le terme normal (A.98) peut s'écrire dans la forme recherchée en prenant $\mathbf{k} + \mathbf{Q} \rightarrow \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$, et $\mathbf{k} \rightarrow \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}'$:

$$H_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow}^{\text{sauts}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow} \exp[i(-(\mathbf{k} + \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a} + \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}})] c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\uparrow} \quad (\text{A.133})$$

$$= \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\sigma} \exp[i(-(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a} + \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} - \mathbf{K}' \cdot \mathbf{a})] c_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K},\sigma}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}',\sigma}, \quad (\text{A.134})$$

qui n'est valide que pour $\mathbf{K} - \mathbf{K}' = \mathbf{Q} + \mathbf{G}$ où \mathbf{G} est un vecteur du réseau réciproque choisi de sorte que \mathbf{K} et \mathbf{K}' demeurent dans la première zone de Brillouin. On peut aussi écrire :

$$[\hat{t}_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} = t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow} \exp[i(-(\mathbf{k} + \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a} + \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} - \mathbf{K}' \cdot \mathbf{a})] \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{K}-\mathbf{K}',\mathbf{Q}+\mathbf{G}}. \quad (\text{A.135})$$

où la somme sur \mathbf{G} , couvrant tous les vecteurs du réseau réciproque original, assure que le terme soit non nul pour la paire appropriée de \mathbf{K}, \mathbf{K}' de la zone de Brillouin originale. En pratique, pour un vecteur \mathbf{Q} donné (un terme du hamiltonien) et un vecteur \mathbf{K} donné (une rangée de la matrice) on peut trouver quel \mathbf{K}' (quelle colonne) contient une entrée non nulle en appliquant le modulo défini en (A.60) au vecteur $\mathbf{K} + \mathbf{Q}$ débordant la zone de Brillouin. La construction numérique de la matrice est ainsi accélérée : pour une matrice de dimension L avec un nombre T de termes $t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\sigma}$ non nuls la complexité est $O(LT)$ plutôt que $O(L^2 T)$ si on vérifie l'existence d'un terme à chaque position dans la matrice. Comparé à une inversion ou une diagonalisation en $O(\sim L^3)$, le gain est non négligeable si T est de l'ordre de L , ce qui est souvent le cas pour les modèles phénoménologiques de cette thèse.

Partie anormale Le terme anormal (A.100) se change dans la forme recherchée en commutant les opérateurs et en prenant $-(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \rightarrow -(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K})$, et $\mathbf{k} \rightarrow \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}'$:

$$H_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\text{paires}} = e^{i\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} \cos((\mathbf{k} + \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a}) c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow} \quad (\text{A.136})$$

$$= -e^{i\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} \cos((\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a} + \mathbf{K}' \cdot \mathbf{a}) c_{-(\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}),\downarrow} c_{\tilde{\mathbf{k}}+\mathbf{K}',\uparrow}, \quad (\text{A.137})$$

aussi valide seulement pour $\mathbf{K} - \mathbf{K}' = \mathbf{Q} + \mathbf{G}$ avec \mathbf{G} choisi pour que \mathbf{K} et \mathbf{K}' soient dans la première zone de Brillouin. On trouve donc :

$$[\hat{\Delta}_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} = -\Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} e^{i\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}} \cos((\mathbf{k} + \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a} + \mathbf{K}' \cdot \mathbf{a}) \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{K}-\mathbf{K}',\mathbf{Q}+\mathbf{G}}. \quad (\text{A.138})$$

Partie normale spin-down Le terme normal (A.98) s'écrit dans la forme recherchée en commutant les opérateurs et en prenant $\mathbf{k} \rightarrow -(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K})$, et $\mathbf{k} + \mathbf{Q} \rightarrow -(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}')$:

$$H_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\downarrow}^{\text{sauts}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\sigma} \exp[i(-(\mathbf{k} + \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a} + \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}})] c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\downarrow} \quad (\text{A.139})$$

$$= - \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\sigma} \exp[i((\tilde{\mathbf{k}} - \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a} + \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{a})] c_{\mathbf{k},\downarrow} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow}^{\dagger} + \text{constante}, \quad (\text{A.140})$$

encore valide seulement pour pour $\mathbf{K} - \mathbf{K}' = \mathbf{Q} + \mathbf{G}$ avec \mathbf{G} choisi pour que \mathbf{K} et \mathbf{K}' soient dans la première zone de Brillouin. Dans ce cas-ci, la commutation des opérateurs avec $\mathbf{K} = \mathbf{K}'$ fait apparaître un terme constant, que l'on peut ignorer. On trouve donc :

$$[\hat{t}_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\downarrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} = -t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\downarrow} \exp[i((\mathbf{k} - \mathbf{Q}/2) \cdot \mathbf{a} + \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{a})] \sum_{\mathbf{G}} \delta_{\mathbf{K}-\mathbf{K}',\mathbf{Q}+\mathbf{G}}. \quad (\text{A.141})$$

A.3.4 Représentation (\mathbf{R},\mathbf{R}') générale

La représentation mixte des $c_{\mathbf{R},\sigma}(\tilde{\mathbf{k}})$ de la section A.2.4 permet de définir une autre représentation matricielle pour l'hamiltonien (42). On cherche à l'exprimer dans la forme suivante :

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{Q},\mathbf{a}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{R},\uparrow}^{\dagger}(\tilde{\mathbf{k}}) & c_{\mathbf{R},\downarrow}(-\tilde{\mathbf{k}}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} & 0 \\ [\Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} & [t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\downarrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{R}',\uparrow}(\tilde{\mathbf{k}}) \\ c_{\mathbf{R}',\downarrow}(-\tilde{\mathbf{k}}) \end{pmatrix} + \text{c.h.} \quad (\text{A.142})$$

où $t_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}^{\sigma}(\tilde{\mathbf{k}})$ et $\Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}(\tilde{\mathbf{k}})$ sont encore des matrices $L \times L$, mais dans une base différente de celle en A.132. Chaque rangée et colonne de la matrice correspond ici à un site \mathbf{R} , permettant par exemple de calculer la densité à chaque site de l'amas. De tels résultats ne sont toutefois pas présentés dans cette thèse.

Partie normale Le terme normal (A.97) peut s'écire dans la forme recherchée en substituant l'équation (A.69) reliant les opérateurs $c_{\mathbf{r},\sigma}$ et $c_{\mathbf{R},\uparrow}(\tilde{\mathbf{k}})$ et en remarquant que le super-réseau est choisi pour que tous les \mathbf{Q} satisfassent $e^{i\mathbf{Q} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} = 1$:

$$H_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow}^{\text{sauts}} = \sum_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow} \exp[i(\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{a}/2) + \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}})] c_{\mathbf{r}+\mathbf{a},\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{r},\uparrow} \quad (\text{A.143})$$

$$= \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow} \exp[i(\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{a}/2) + \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}})] \frac{L}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}},\tilde{\mathbf{k}}'} e^{i(\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \tilde{\mathbf{r}}} c_{\mathbf{R}+\mathbf{a},\uparrow}^{\dagger}(\tilde{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{R},\uparrow}(\tilde{\mathbf{k}}') \quad (\text{A.144})$$

$$= \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q},\mathbf{a},\uparrow} \exp[i(\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{a}/2) + \phi_{\mathbf{Q},\mathbf{a}})] c_{\mathbf{R}+\mathbf{a},\uparrow}^{\dagger}(\tilde{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{R},\uparrow}(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (\text{A.145})$$

où fut utilisé la définition du delta de Kronecker $\delta_{\tilde{\mathbf{k}}', \tilde{\mathbf{k}}} = \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} e^{i(\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \tilde{\mathbf{r}}}$. On peut ensuite utiliser la propriété (A.82) des opérateurs $c_{\mathbf{R}, \sigma}(\tilde{\mathbf{k}})$, stipulant qu'ils sont définis modulo une phase en \mathbf{R} . Pour ce faire, il faut introduire la notation $\mathbf{R} + \mathbf{a} \equiv \mathbf{a}_{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{a}}_{\mathbf{R}} + \mathbf{A}_{\mathbf{R}}$, permettant d'écrire :

$$= \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}, \uparrow} \exp [i (\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{a}/2) + \phi_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}})] e^{-i \tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{a}}_{\mathbf{R}}} c_{\mathbf{A}_{\mathbf{R}}, \uparrow}^{\dagger}(\tilde{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{R}, \uparrow}(\tilde{\mathbf{k}}). \quad (\text{A.146})$$

La notation $\mathbf{R} + \mathbf{a} \equiv \mathbf{a}_{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{a}}_{\mathbf{R}} + \mathbf{A}_{\mathbf{R}}$, pouvant se lire «a partant de \mathbf{R} », est nécessaire parce que le vecteur $\mathbf{R} + \mathbf{a}$ peut sortir de la cellule périodique⁵. Décomposer ce dernier comme $\mathbf{a}_{\mathbf{R}} = \tilde{\mathbf{a}}_{\mathbf{R}} + \mathbf{A}_{\mathbf{R}}$ suivant (A.56-A.57) permet donc de travailler avec la portion interamas $\tilde{\mathbf{a}}_{\mathbf{R}}$, et le reste intra-amas $\mathbf{A}_{\mathbf{R}}$, qui dépendent de quel \mathbf{R} est le point de départ.

Pour les éléments de matrice dans la forme (A.142), on trouve donc :

$$[t_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}, \uparrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} = \frac{1}{2} t_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}, \uparrow} \exp [i (\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R}' + \mathbf{a}/2) + \phi_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}} - \tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{a}}_{\mathbf{R}'})] \delta_{\mathbf{R}, \mathbf{A}_{\mathbf{R}'}}. \quad (\text{A.147})$$

De plus, dans ce cas-ci, les $c_{\mathbf{R}, \sigma}(\tilde{\mathbf{k}})$ ont la périodicité de la zone de Brillouin réduite, comme démontré en (A.79). On peut donc directement permuter les opérateurs et inverser la somme de (A.146) pour obtenir la partie spin down :

$$[t_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}, \downarrow}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} = -\frac{1}{2} t_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}} \exp [i (\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{a}/2) + \phi_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}} - \tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{a}}_{\mathbf{R}})] \delta_{\mathbf{A}_{\mathbf{R}}, \mathbf{R}'}. \quad (\text{A.148})$$

Partie anormale Pour le terme anormal (A.99), en appliquant les mêmes idées, on a :

$$H_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}}^{\text{paires}} = \sum_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}} \exp [i (\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{a}/2) + \theta_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}})] (c_{\mathbf{r} + \mathbf{a}, \uparrow} c_{\mathbf{r}, \downarrow} - c_{\mathbf{r} + \mathbf{a}, \downarrow} c_{\mathbf{r}, \uparrow}) \quad (\text{A.149})$$

$$= - \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}} \exp [i (\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{a}/2) + \theta_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}})] \times \frac{L}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}}'} e^{i(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{k}}') \cdot \tilde{\mathbf{r}}} (c_{\mathbf{R}, \downarrow}(\tilde{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{R} + \mathbf{a}, \uparrow}(\tilde{\mathbf{k}}') + c_{\mathbf{R} + \mathbf{a}, \downarrow}(\tilde{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{R}, \uparrow}(\tilde{\mathbf{k}}')) \quad (\text{A.150})$$

$$= - \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}} \exp [i (\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{a}/2) + \theta_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}})] \times (c_{\mathbf{R}, \downarrow}(\tilde{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{R} + \mathbf{a}, \uparrow}(-\tilde{\mathbf{k}}) + c_{\mathbf{R} + \mathbf{a}, \downarrow}(\tilde{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{R}, \uparrow}(-\tilde{\mathbf{k}})) \quad (\text{A.151})$$

$$= - \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{R}} \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}} \exp [i (\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{a}/2) + \theta_{\mathbf{Q}, \mathbf{a}} + \tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{a}}_{\mathbf{R}})] \times (c_{\mathbf{R}, \downarrow}(\tilde{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{A}_{\mathbf{R}}, \uparrow}(-\tilde{\mathbf{k}}) + c_{\mathbf{A}_{\mathbf{R}}, \downarrow}(\tilde{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{R}, \uparrow}(-\tilde{\mathbf{k}})) \quad (\text{A.152})$$

5. Il aurait été encombrant d'écrire $\widetilde{\mathbf{R} + \mathbf{a}}$ et impossible d'avoir une version majuscule, une meilleure notation serait probablement pertinente à cet effet. On suit ici celle présentée dans les références [194] et [155]

On trouve donc :

$$\begin{aligned} [\Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} = & -\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}\left(\exp\left[i\left(\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{a}/2)+\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}+\tilde{\mathbf{k}}\cdot\tilde{\mathbf{a}}_{\mathbf{R}}\right)\right]\delta_{\mathbf{A}_{\mathbf{R}},\mathbf{R}'}\right. \\ & \left.+\exp\left[i\left(\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}'+\mathbf{a}/2)+\theta_{\mathbf{Q},\mathbf{a}}+\tilde{\mathbf{k}}\cdot\tilde{\mathbf{a}}_{\mathbf{R}'}\right)\right]\delta_{\mathbf{R},\mathbf{A}_{\mathbf{R}'}}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.153})$$

A.4 Dérivées des énergies propres

On s'intéresse aux dérivées par rapport à \mathbf{k} des valeurs propres $E_{n\mathbf{k}}$, solutions de l'équation aux valeurs propres $H_{\mathbf{k}}|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = E_{n\mathbf{k}}|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$. En laissant la dépendance en \mathbf{k} implicite, on dérive la relation d'orthogonalité $\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{n,m}$ pour les vecteurs propres :

$$\frac{\partial\langle\psi_n|}{\partial k_\alpha}|\psi_m\rangle + \langle\psi_n|\frac{\partial|\psi_m\rangle}{\partial k_\alpha} = 0, \quad (\text{A.154})$$

ce qui permet d'écrire la dérivée première de E_n comme :

$$\frac{\partial}{\partial k_\alpha}\langle\psi_n|H|\psi_n\rangle = \langle\psi_n|\frac{\partial H}{\partial k_\alpha}|\psi_n\rangle + \underbrace{\frac{\partial\langle\psi_n|}{\partial k_\alpha}E_n|\psi_n\rangle + \langle\psi_n|E_n\frac{\partial|\psi_n\rangle}{\partial k_\alpha}}_{=0} \quad (\text{A.155})$$

$$\frac{\partial E_n}{\partial k_\alpha} = \langle\psi_n|\frac{\partial H}{\partial k_\alpha}|\psi_n\rangle. \quad (\text{A.156})$$

Cette équation est connue comme le théorème de Hellmann-Feynman [195, 196].

On s'intéresse ensuite à la dérivée d'un état propre. Dans la définition de la dérivée, on développe $|\psi_n(k+\delta k)\rangle$ en considérant $[H(k+\delta k) - H(k)]$ comme une perturbation. Avec δk infinitésimal, le terme de premier ordre est alors exact :

$$\frac{\partial|\psi_n(k)\rangle}{\partial k} = \lim_{\delta k \rightarrow 0} \frac{|\psi_n(k+\delta k)\rangle - |\psi_n(k)\rangle}{\delta k} \quad (\text{A.157})$$

$$= \lim_{\delta k \rightarrow 0} \frac{1}{\delta k} \sum_{m \neq n} \frac{\langle\psi_m(k)|[H(k+\delta k) - H(k)]|\psi_n(k)\rangle}{E_n(k) - E_m(k)} |\psi_m(k)\rangle \quad (\text{A.158})$$

$$= \sum_{m \neq n} \frac{\langle\psi_m|\frac{\partial H}{\partial k_\alpha}|\psi_n\rangle}{E_n - E_m} |\psi_m\rangle. \quad (\text{A.159})$$

C'est aussi une expression utile pour calculer la connexion de Berry [197, 175].

On s'intéresse finalement à la dérivée seconde des valeurs propres, pour laquelle on doit exprimer la dérivée de l'équation aux valeurs propres $H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$:

$$\frac{\partial H}{\partial k_\alpha}|\psi_n\rangle = \frac{\partial E_n}{\partial k_\alpha}|\psi_n\rangle - (H - E_n)\frac{\partial|\psi_n\rangle}{\partial k_\alpha}. \quad (\text{A.160})$$

Il faut être prudent avec $(H - E_n)$ car son déterminant est nul et donc il n'a pas d'inverse. Enfin,

avec les équations (A.154), (A.159) et (A.160), et en faisant intervenir l'hermiticité de H on obtient :

$$\frac{\partial^2}{\partial k_\beta \partial k_\alpha} \langle \psi_n | H | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \frac{\partial^2 H}{\partial k_\beta \partial k_\alpha} | \psi_n \rangle + \frac{\partial \langle \psi_n |}{\partial k_\beta} \frac{\partial H}{\partial k_\alpha} | \psi_n \rangle + \langle \psi_n | \frac{\partial H}{\partial k_\alpha} \frac{\partial | \psi_n \rangle}{\partial k_\beta} \quad (\text{A.161})$$

$$= \langle \psi_n | \frac{\partial^2 H}{\partial k_\beta \partial k_\alpha} | \psi_n \rangle - 2 \frac{\partial \langle \psi_n |}{\partial k_\beta} (H - E_n) \frac{\partial | \psi_n \rangle}{\partial k_\alpha} \quad (\text{A.162})$$

$$= \langle \psi_n | \frac{\partial^2 H}{\partial k_\beta \partial k_\alpha} | \psi_n \rangle - 2 \sum_{m \neq n} \sum_{m' \neq n} \frac{\langle \psi_n | \frac{\partial H}{\partial k_\beta} | \psi_m \rangle}{E_n - E_m} \langle \psi_m | (H - E_n) | \psi_{m'} \rangle \frac{\langle \psi_{m'} | \frac{\partial H}{\partial k_\alpha} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} \quad (\text{A.163})$$

$$\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_\beta \partial k_\alpha} = \langle \psi_n | \frac{\partial^2 H}{\partial k_\beta \partial k_\alpha} | \psi_n \rangle + 2 \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n | \frac{\partial H}{\partial k_\beta} | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \frac{\partial H}{\partial k_\alpha} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m}. \quad (\text{A.164})$$

C'est avec cette équation qu'on calcule les termes de masse dans les équations du transport.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] S. Verret, M. Charlebois, D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. B* **95**(5), 054518 (2017).
- [2] S. Verret, O. Simard, M. Charlebois, D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. B* **96**(12), 125139 (2017).
- [3] M. Charlebois, S. Verret, A. Foley, O. Simard, D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. B* **96**(20), 205132 (2017).
- [4] R. P. Feynman. *Reviews of Modern Physics* **29**(2), 205 (1957).
- [5] D. van Delft et P. Kes. *Physics Today* **63**(9), 38–43 (2010).
- [6] J. Bardeen, L. N. Cooper et J. R. Schrieffer. *Phys. Rev.* **106**(1), 162–164 (1957).
- [7] J. Bardeen, L. N. Cooper et J. R. Schrieffer. *Phys. Rev.* **108**(5), 1175–1204 (1957).
- [8] D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault et K. Bechgaard. *Journal de Physique Lettres* **41**(4), 95–98 (1980).
- [9] J. Singleton et C. Mielke. *Contemporary Physics* **43**(2), 63–96 (2002).
- [10] A. Y. Ganin, Y. Takabayashi, Y. Z. Khimyak, S. Margadonna, A. Tamai, M. J. Rosseinsky et K. Prassides. *Nature Materials* **7**(5), nmat2179 (2008).
- [11] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Lieke, D. Meschede, W. Franz et H. Schäfer. *Phys. Rev. Lett.* **43**(25), 1892–1896 (1979).
- [12] P. Coleman. Dans *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*. American Cancer Society (2007).
- [13] B. L. Scott, E. Colineau, F. Wastin, G. H. Lander, G. R. Stewart, J. D. Thompson, J. L. Sarrao, J. Rebizant, L. A. Morales et P. Boulet. *Nature* **420**(6913), 297 (2002).
- [14] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano et H. Hosono. *Journal of the American Chemical Society* **130**(11), 3296–3297 (2008).
- [15] E. Dagotto. *Reviews of Modern Physics* **85**(2), 849–867 (2013).
- [16] J.-F. Ge, Z.-L. Liu, C. Liu, C.-L. Gao, D. Qian, Q.-K. Xue, Y. Liu et J.-F. Jia. *Nature Materials* **14**(3), 285–289 (2015).
- [17] J. Orenstein et A. J. Millis. *Science* **288**(5465), 468–474 (2000).
- [18] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida et J. Zaanen. *Nature* **518**(7538), 179–186 (2015).
- [19] J. G. Bednorz et K. A. Müller. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **64**(2), 189–193 (1986).
- [20] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang et C. W. Chu. *Phys. Rev. Lett.* **58**(9), 908–910 (1987).
- [21] R. Hott, R. Kleiner, T. Wolf et G. Zwicknagl. Dans *Frontiers in Superconducting Materials*, 1–69. Springer, Berlin, Heidelberg (2005).
- [22] A. Schilling, M. Cantoni, J. D. Guo et H. R. Ott. *Nature* **363**, 56 (1993).
- [23] L. Gao, Y. Y. Xue, F. Chen, Q. Xiong, R. L. Meng, D. Ramirez, C. W. Chu, J. H. Eggert et H. K. Mao. *Phys. Rev. B* **50**(6), 4260–4263 (1994).

- [24] S. Blundell. *Superconductivity : A Very Short Introduction*. Oxford University Press, Oxford; New York, (2009).
- [25] A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, V. Ksenofontov et S. I. Shylin. *Nature* **525**(7567), 73–76 (2015).
- [26] A. Bianconi et T. Jarlborg. *EPL (Europhysics Letters)* **112**(3), 37001 (2015).
- [27] N. W. Ashcroft. *Phys. Rev. Lett.* **21**(26), 1748–1749 (1968).
- [28] B. Maiorov, H. Wang, J. L. MacManus-Driscoll, L. Civale, M. Maley, Q. X. Jia et S. R. Foltyn. *Nature Materials* **6**, 631–642 (2007).
- [29] A. Gurevich. *Nature Materials* **10**, 255–259 (2011).
- [30] R. M. Scanlan, A. P. Malozemoff et D. C. Larbalestier. *Proceedings of the IEEE* **92**(10), 1639–1654 (2004).
- [31] R. R. Mansour. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques* **50**(3), 750–759 (2002).
- [32] D. Drung, C. Abmann, J. Beyer, A. Kirste, M. Peters, F. Ruede et T. Schurig. *IEEE Transactions on Applied Superconductivity* **17**(2), 699–704 (2007).
- [33] A. P. Malozemoff. *Nature Materials* **6**, 617–619 (2007).
- [34] S. Verret. *Couplage Interplan et Compétition de Phases Dans Le Modèle de Hubbard Des Cuprates*. Mémoire de Maîtrise, Université de Sherbrooke, (2014).
- [35] M. B. J. Meinders, H. Eskes et G. A. Sawatzky. *Phys. Rev. B* **48**(6), 3916–3926 (1993).
- [36] O. Cyr-Choinière, R. Daou, F. Laliberté, C. Collignon, S. Badoux, D. LeBoeuf, J. Chang, B. J. Ramshaw, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, J.-Q. Yan, J.-G. Cheng, J.-S. Zhou, J. B. Goodenough, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, N. Doiron-Leyraud et L. Taillefer. *Phys. Rev. B* **97**(6), 064502 (2018).
- [37] T. Timusk. *Physics in Canada* **67**(2), 99 (2011).
- [38] C. E. Gough, M. S. Colclough, E. M. Forgan, R. G. Jordan, M. Keene, C. M. Muirhead, A. I. M. Rae, N. Thomas, J. S. Abell et S. Sutton. *Nature* **326**(6116), 855 (1987).
- [39] Ø. Fischer, M. Kugler, I. Maggio-Aprile, C. Berthod et C. Renner. *Reviews of Modern Physics* **79**(1), 353–419 (2007).
- [40] D. A. Wollman, D. J. Van Harlingen, W. C. Lee, D. M. Ginsberg et A. J. Leggett. *Phys. Rev. Lett.* **71**(13), 2134–2137 (1993).
- [41] C. C. Tsuei, J. R. Kirtley, C. C. Chi, L. S. Yu-Jahnes, A. Gupta, T. Shaw, J. Z. Sun et M. B. Ketchen. *Phys. Rev. Lett.* **73**(4), 593–596 (1994).
- [42] A. Damascelli, Z. Hussain et Z.-X. Shen. *Reviews of Modern Physics* **75**(2), 473–541 (2003).
- [43] H. Ding, J. C. Campuzano, J. Giapintzakis, K. Kadowaki, M. R. Norman, M. Randeria, T. Mochiku, T. Takahashi et T. Yokoya. *Nature* **382**(6586), 51 (1996).
- [44] C. Pakokthom, B. Krunavakarn, P. Udomsamuthirun et S. Yoksan. *Journal of Superconductivity* **11**(4), 429–432 (1998).
- [45] N. F. Mott. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* **19**(160), 835–852 (1969).
- [46] P. A. Lee, T. M. Rice et P. W. Anderson. *Phys. Rev. Lett.* **31**(7), 462–465 (1973).
- [47] M. J. Rice et S. Strässler. *Solid State Communications* **13**(9), 1389–1392 (1973).
- [48] H. Alloul, T. Ohno et P. Mendels. *Phys. Rev. Lett.* **63**(16), 1700–1703 (1989).
- [49] W. W. Warren, R. E. Walstedt, G. F. Brennert, R. J. Cava, R. Tycko, R. F. Bell et G. Dabbagh. *Phys. Rev. Lett.* **62**(10), 1193–1196 (1989).

- [50] T. Timusk et B. Statt. *Reports on Progress in Physics* **62**(1), 61 (1999).
- [51] M. R. Norman, D. Pines et C. Kallin. *Adv. Phys.* **54**(8), 715–733 (2005).
- [52] A. A. Kordyuk. *Low Temperature Physics* **41**(5), 319–341 (2015).
- [53] T. J. Reber, N. C. Plumb, Z. Sun, Y. Cao, Q. Wang, K. McElroy, H. Iwasawa, M. Arita, J. S. Wen, Z. J. Xu, G. Gu, Y. Yoshida, H. Eisaki, Y. Aiura et D. S. Dessau. *Nat. Phys.* **8**, 606 (2012).
- [54] M. Hashimoto, I. M. Vishik, R.-H. He, T. P. Devereaux et Z.-X. Shen. *Nat. Phys.* **10**(7), 483–495 (2014).
- [55] T. Yoshida, M. Hashimoto, I. M. Vishik, Z.-X. Shen et A. Fujimori. *Journal of the Physical Society of Japan* **81**(1), 011006 (2011).
- [56] A. Kanigel, M. R. Norman, M. Randeria, U. Chatterjee, S. Souma, A. Kaminski, H. M. Fretwell, S. Rosenkranz, M. Shi, T. Sato, T. Takahashi, Z. Z. Li, H. Raffy, K. Kadowaki, D. Hinks, L. Ozyuzer et J. C. Campuzano. *Nat. Phys.* **2**, 447 (2006).
- [57] J. E. Hoffman, K. McElroy, D.-H. Lee, K. M. Lang, H. Eisaki, S. Uchida et J. C. Davis. *Science* **297**(5584), 1148–1151 (2002).
- [58] K. McElroy, D.-H. Lee, J. E. Hoffman, K. M. Lang, J. Lee, E. W. Hudson, H. Eisaki, S. Uchida et J. C. Davis. *Phys. Rev. Lett.* **94**(19), 197005 (2005).
- [59] Y. Kohsaka, C. Taylor, P. Wahl, A. Schmidt, J. Lee, K. Fujita, J. W. Alldredge, K. McElroy, J. Lee, H. Eisaki, S. Uchida, D.-H. Lee et J. C. Davis. *Nature* **454**(7208), 1072–1078 (2008).
- [60] D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser, C.-H. Park, A. Y. Matsuura, J. N. Eckstein, I. Bozovic, P. Fournier, A. Kapitulnik, W. E. Spicer et Z.-X. Shen. *Phys. Rev. Lett.* **76**(25), 4841–4844 (1996).
- [61] M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria, J. C. Campuzano, T. Yokoya, T. Takeuchi, T. Takahashi, T. Mochiku, K. Kadowaki, P. Guptasarma et D. G. Hinks. *Nature* **392**, 157 (1998).
- [62] T. Kondo, A. D. Palczewski, Y. Hamaya, T. Takeuchi, J. S. Wen, Z. J. Xu, G. Gu et A. Kaminski. *Phys. Rev. Lett.* **111**(15), 157003 (2013).
- [63] W. D. Wise, K. Chatterjee, M. C. Boyer, T. Kondo, T. Takeuchi, H. Ikuta, Z. Xu, J. Wen, G. D. Gu, Y. Wang et E. W. Hudson. *Nat. Phys.* **5**(3), 213–216 (2009).
- [64] K. McElroy, D.-H. Lee, J. E. Hoffman, K. M. Lang, E. W. Hudson, H. Eisaki, S. Uchida, J. Lee et J. C. Davis. *arXiv:cond-mat/0404005* (2004). Version précédente de [58].
- [65] R. Comin et A. Damascelli. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **7**(1), 369–405 (2016).
- [66] S.-W. Cheong, G. Aeppli, T. E. Mason, H. Mook, S. M. Hayden, P. C. Canfield, Z. Fisk, K. N. Clausen et J. L. Martinez. *Phys. Rev. Lett.* **67**(13), 1791–1794 (1991).
- [67] J. M. Tranquada, D. J. Buttrey, V. Sachan et J. E. Lorenzo. *Phys. Rev. Lett.* **73**(7), 1003–1006 (1994).
- [68] J. M. Tranquada. *AIP Conference Proceedings* **1550**(1), 114–187 (2013).
- [69] J. E. Hoffman, E. W. Hudson, K. M. Lang, V. Madhavan, H. Eisaki, S. Uchida et J. C. Davis. *Science* **295**(5554), 466–469 (2002).
- [70] Y. Kohsaka, C. Taylor, K. Fujita, A. Schmidt, C. Lupien, T. Hanaguri, M. Azuma, M. Takano, H. Eisaki, H. Takagi, S. Uchida et J. C. Davis. *Science* **315**(5817), 1380–1385 (2007).
- [71] G. Ghiringhelli, M. L. Tacon, M. Minola, S. Blanco-Canosa, C. Mazzoli, N. B. Brookes, G. M. D. Luca, A. Frano, D. G. Hawthorn, F. He, T. Loew, M. M. Sala, D. C. Peets, M. Salluzzo, E. Schierle, R. Sutarto, G. A. Sawatzky, E. Weschke, B. Keimer et L. Braicovich. *Science* **337**(6096), 821–825 (2012).
- [72] K. Fujita, M. H. Hamidian, S. D. Edkins, C. K. Kim, Y. Kohsaka, M. Azuma, M. Takano, H. Takagi, H. Eisaki, S.-i. Uchida, A. Allais, M. J. Lawler, E.-A. Kim, S. Sachdev et J. C. S. Davis. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **111**(30), E3026–E3032 (2014).

- [73] M. H. Hamidian, S. D. Edkins, C. K. Kim, J. C. Davis, A. P. Mackenzie, H. Eisaki, S. Uchida, M. J. Lawler, E.-A. Kim, S. Sachdev et K. Fujita. *Nat. Phys.* **12**(2), 150–156 (2016).
- [74] R. Comin, R. Sutarto, F. He, E. H. da Silva Neto, L. Chauviere, A. Fraño, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, Y. Yoshida, H. Eisaki, A. J. Achkar, D. G. Hawthorn, B. Keimer, G. A. Sawatzky et A. Damascelli. *Nature Materials* **14**(8), 796–800 (2015).
- [75] R. Comin, R. Sutarto, E. H. d. S. Neto, L. Chauviere, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, F. He, G. A. Sawatzky et A. Damascelli. *Science* **347**(6228), 1335–1339 (2015).
- [76] T. Machida, Y. Kohsaka, K. Matsuoka, K. Iwaya, T. Hanaguri et T. Tamegai. *Nat. Commun.* **7**, 11747 (2016).
- [77] H. Jang, W.-S. Lee, H. Nojiri, S. Matsuzawa, H. Yasumura, L. Nie, A. V. Maharaj, S. Gerber, Y.-J. Liu, A. Mehta, D. A. Bonn, R. Liang, W. N. Hardy, C. A. Burns, Z. Islam, S. Song, J. Hastings, T. P. Devereaux, Z.-X. Shen, S. A. Kivelson, C.-C. Kao, D. Zhu et J.-S. Lee. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **113**(51), 14645–14650 (2016).
- [78] A. Mesaros, K. Fujita, S. D. Edkins, M. H. Hamidian, H. Eisaki, S.-i. Uchida, J. C. S. Davis, M. J. Lawler et E.-A. Kim. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **113**(45), 12661–12666 (2016).
- [79] R. Comin, A. Frano, M. M. Yee, Y. Yoshida, H. Eisaki, E. Schierle, E. Weschke, R. Sutarto, F. He, A. Soumyanarayanan, Y. He, M. L. Tacon, I. S. Elfimov, J. E. Hoffman, G. A. Sawatzky, B. Keimer et A. Damascelli. *Science* **343**(6169), 390–392 (2014).
- [80] E. H. d. S. Neto, P. Aynajian, A. Frano, R. Comin, E. Schierle, E. Weschke, A. Gyenis, J. Wen, J. Schneeloch, Z. Xu, S. Ono, G. Gu, M. L. Tacon et A. Yazdani. *Science* **343**(6169), 393–396 (2014).
- [81] P. A. Lee. *Phys. Rev. X* **4**(3), 031017 (2014).
- [82] X. Montiel, T. Kloss et C. Pépin. *Phys. Rev. B* **95**(10), 104510 (2017).
- [83] B. M. Andersen, P. Hedegård et H. Bruus. *Phys. Rev. B* **67**(13), 134528 (2003).
- [84] J.-i. Kishine, P. A. Lee et X.-G. Wen. *Phys. Rev. Lett.* **86**(23), 5365–5368 (2001).
- [85] P. A. Lee et X.-G. Wen. *Phys. Rev. B* **63**(22), 224517 (2001).
- [86] H.-D. Chen, J.-P. Hu, S. Capponi, E. Arrigoni et S.-C. Zhang. *Phys. Rev. Lett.* **89**(13), 137004 (2002).
- [87] H.-D. Chen, O. Vafek, A. Yazdani et S.-C. Zhang. *Phys. Rev. Lett.* **93**(18), 187002 (2004).
- [88] K. Seo, H.-D. Chen et J. Hu. *Phys. Rev. B* **76**(2), 020511 (2007).
- [89] K. Seo, H.-D. Chen et J. Hu. *Phys. Rev. B* **78**(9), 094510 (2008).
- [90] D. F. Agterberg et J. Garaud. *Phys. Rev. B* **91**(10), 104512 (2015).
- [91] Y. Wang, D. F. Agterberg et A. Chubukov. *Phys. Rev. Lett.* **114**(19), 197001 (2015).
- [92] A. Himeda, T. Kato et M. Ogata. *Phys. Rev. Lett.* **88**(11), 117001 (2002).
- [93] M. Raczkowski, M. Capello, D. Poilblanc, R. Frésard et A. M. Oleś. *Phys. Rev. B* **76**(14), 140505 (2007).
- [94] H. Freire, V. S. de Carvalho et C. Pépin. *Phys. Rev. B* **92**(4), 045132 (2015).
- [95] E. Fradkin, S. A. Kivelson et J. M. Tranquada. *Reviews of Modern Physics* **87**(2), 457–482 (2015).
- [96] M. H. Hamidian, S. D. Edkins, S. H. Joo, A. Kostin, H. Eisaki, S. Uchida, M. J. Lawler, E.-A. Kim, A. P. Mackenzie, K. Fujita, J. Lee et J. C. S. Davis. *Nature* **532**(7599), 343–347 (2016).
- [97] S. Edkins. *Visualising the Charge and Cooper-Pair Density Waves in Cuprates*. Thèse de Doctorat, St-Andrews, (2017).

- [98] I. Maggio-Aprile, C. Renner, A. Erb, E. Walker et Ø. Fischer. *Phys. Rev. Lett.* **75**(14), 2754–2757 (1995).
- [99] S. H. Pan, E. W. Hudson, A. K. Gupta, K.-W. Ng, H. Eisaki, S. Uchida et J. C. Davis. *Phys. Rev. Lett.* **85**(7), 1536–1539 (2000).
- [100] B. W. Hoogenboom, C. Renner, B. Revaz, I. Maggio-Aprile et Ø. Fischer. *Physica C: Superconductivity* **332**(1–4), 440–444 (2000).
- [101] G. Levy, M. Kugler, A. A. Manuel, Ø. Fischer et M. Li. *Phys. Rev. Lett.* **95**(25), 257005 (2005).
- [102] J. Bruér, I. Maggio-Aprile, N. Jenkins, Z. Ristić, A. Erb, C. Berthod, Ø. Fischer et C. Renner. *Nat. Commun.* **7**, 11139 (2016).
- [103] S. Yoshizawa, T. Koseki, K. Matsuba, T. Mochiku, K. Hirata et N. Nishida. *Journal of the Physical Society of Japan* **82**(8), 083706 (2013).
- [104] S. Badoux, W. Tabis, F. Laliberté, G. Grissonnanche, B. Vignolle, D. Vignolles, J. Béard, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, L. Taillefer et C. Proust. *Nature* **531**(7593), 210–214 (2016).
- [105] C. Collignon, S. Badoux, S. A. A. Afshar, B. Michon, F. Laliberté, O. Cyr-Choinière, J.-S. Zhou, S. Licciardello, S. Wiedmann, N. Doiron-Leyraud et L. Taillefer. *Phys. Rev. B* **95**(22), 224517 (2017).
- [106] S. Kawasaki, Z. Li, M. Kitahashi, C. T. Lin, P. L. Kuhns, A. P. Reyes et G.-q. Zheng. *Nat. Commun.* **8**(1) (2017).
- [107] O. Cyr-Choinière, S. Badoux, G. Grissonnanche, B. Michon, S. Afshar, S. Fortier, D. LeBoeuf, D. Graf, J. Day, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud et L. Taillefer. *Phys. Rev. X* **7**(3), 031042 (2017).
- [108] L. Fratino, P. Sémon, G. Sordi et A.-M. S. Tremblay. *Sci. Rep.* **6**, 22715 (2016).
- [109] J. G. Storey. *EPL (Europhysics Letters)* **113**(2), 27003 (2016).
- [110] A. Eberlein, W. Metzner, S. Sachdev et H. Yamase. *Phys. Rev. Lett.* **117**(18), 187001 (2016).
- [111] S. Chatterjee et S. Sachdev. *Phys. Rev. B* **94**(20), 205117 (2016).
- [112] A. V. Maharaj, I. Esterlis, Y. Zhang, B. J. Ramshaw et S. A. Kivelson. *Phys. Rev. B* **96**(4), 045132 (2017).
- [113] C. Morice, X. Montiel et C. Pépin. *Phys. Rev. B* **96**(13), 134511 (2017).
- [114] G. Sharma, S. Nandy, A. Taraphder et S. Tewari. *arXiv:1703.04620 [cond-mat]* (2017).
- [115] N. W. Ashcroft et N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Brooks Cole Thomson Learning, (1976).
- [116] R. Côté. *Physique de La Matière Condensée Avancée*. Université de Sherbrooke, (2012).
- [117] M. R. Norman, M. Randeria, H. Ding et J. C. Campuzano. *Phys. Rev. B* **52**(1), 615–622 (1995).
- [118] A. I. Liechtenstein, O. Gunnarsson, O. K. Andersen et R. M. Martin. *Phys. Rev. B* **54**(17), 12505–12508 (1996).
- [119] K.-Y. Yang, T. M. Rice et F.-C. Zhang. *Phys. Rev. B* **73**(17), 174501 (2006).
- [120] S. Kancharla, B. Kyung, D. Sénéchal, M. Civelli, M. Capone, G. Kotliar et A.-M. Tremblay. *Phys. Rev. B* **77**(18), 184516 (2008).
- [121] A. Allais, D. Chowdhury et S. Sachdev. *Nat. Commun.* **5**, 5771 (2014).
- [122] M. C. Schabel, C.-H. Park, A. Matsuura, Z.-X. Shen, D. A. Bonn, R. Liang et W. N. Hardy. *Phys. Rev. B* **57**(10), 6090–6106 (1998).
- [123] R. S. Markiewicz, S. Sahrakorpi, M. Lindroos, H. Lin et A. Bansil. *Phys. Rev. B* **72**(5), 054519 (2005).
- [124] O. Andersen, A. Liechtenstein, O. Jepsen et F. Paulsen. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **56**(12), 1573–1591 (1995).

- [125] E. Pavarini, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta, O. Jepsen et O. K. Andersen. *Phys. Rev. Lett.* **87**(4) (2001).
- [126] A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, M. Knupfer et J. Fink. *Phys. Rev. B* **67**(6), 064504 (2003).
- [127] R.-H. He, M. Hashimoto, H. Karapetyan, J. D. Koralek, J. P. Hinton, J. P. Testaud, V. Nathan, Y. Yoshida, H. Yao, K. Tanaka, W. Meevasana, R. G. Moore, D. H. Lu, S.-K. Mo, M. Ishikado, H. Eisaki, Z. Hussain, T. P. Devereaux, S. A. Kivelson, J. Orenstein, A. Kapitulnik et Z.-X. Shen. *Science* **331**(6024), 1579–1583 (2011).
- [128] R. S. Markiewicz, I. G. Buda, P. Mistark, C. Lane et A. Bansil. *Sci. Rep.* **7**, 44008 (2017).
- [129] A.-M. S. Tremblay, B. Kyung et D. Sénéchal. *Low Temperature Physics* **32**(4), 424–451 (2006).
- [130] J. Hubbard. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **276**(1365), 238–257 (1963).
- [131] P. W. Anderson. *Science* **235**(4793), 1196–1198 (1987).
- [132] D. J. Scalapino. *Reviews of Modern Physics* **84**(4), 1383–1417 (2012).
- [133] Simons Collaboration on the Many-Electron Problem, J. P. F. LeBlanc, A. E. Antipov, F. Becca, I. W. Bulik, G. K.-L. Chan, C.-M. Chung, Y. Deng, M. Ferrero, T. M. Henderson, C. A. Jiménez-Hoyos, E. Kozik, X.-W. Liu, A. J. Millis, N. V. Prokof'ev, M. Qin, G. E. Scuseria, H. Shi, B. V. Svistunov, L. F. Tocchio, I. S. Tupitsyn, S. R. White, S. Zhang, B.-X. Zheng, Z. Zhu et E. Gull. *Phys. Rev. X* **5**(4), 041041 (2015).
- [134] B. Kyung. *Phys. Rev. B* **62**(13), 9083–9088 (2000).
- [135] D. Sénéchal, P.-L. Lavertu, M.-A. Marois et A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. Lett.* **94**(15), 156404 (2005).
- [136] M. Capone et G. Kotliar. *Phys. Rev. B* **74**(5), 054513 (August 30, 2006).
- [137] J. Wang, A. Eberlein et W. Metzner. *Phys. Rev. B* **89**(12), 121116 (2014).
- [138] C. J. Halboth et W. Metzner. *Phys. Rev. B* **61**(11), 7364–7377 (2000).
- [139] M. Raczkowski, R. Frésard et A. M. Oleś. *Europhysics Letters* **76**(1), 128–134 (2006).
- [140] A. Allais, J. Bauer et S. Sachdev. *Phys. Rev. B* **90**(15), 155114 (2014).
- [141] B. Fauqué, Y. Sidis, V. Hinkov, S. Pailhès, C. T. Lin, X. Chaud et P. Bourges. *Phys. Rev. Lett.* **96**(19), 197001 (2006).
- [142] A. Kapitulnik, J. Xia, E. Schemm et A. Palevski. *New J. Phys.* **11**(5), 055060 (2009).
- [143] L. Zhao, C. A. Belvin, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, N. P. Armitage et D. Hsieh. *Nat. Phys.* **13**(3), 250–254 (2017).
- [144] O. Cyr-Choinière, G. Grissonnanche, S. Badoux, J. Day, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud et L. Taillefer. *Phys. Rev. B* **92**(22), 224502 (2015).
- [145] S. Sachdev. *Phil. Trans. R. Soc. A* **374**(2075), 20150248 (2016).
- [146] M. S. Scheurer, S. Chatterjee, W. Wu, M. Ferrero, A. Georges et S. Sachdev. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 201720580 (2018).
- [147] C. M. Varma. *Phys. Rev. B* **55**(21), 14554–14580 (1997).
- [148] C. M. Varma. *Phys. Rev. B* **73**(15), 155113 (2006).
- [149] S. Chakravarty, R. B. Laughlin, D. K. Morr et C. Nayak. *Phys. Rev. B* **63**(9), 094503 (2001).
- [150] S. Chakravarty. *Phys. Rev. B* **66**(22), 224505 (2002).
- [151] E. Demler, W. Hanke et S.-C. Zhang. *Reviews of Modern Physics* **76**(3), 909–974 (2004).
- [152] L. E. Hayward, D. G. Hawthorn, R. G. Melko et S. Sachdev. *Science* **343**(6177), 1336–1339 (2014).
- [153] I. Affleck et J. B. Marston. *Phys. Rev. B* **37**(7), 3774–3777 (1988).

- [154] J. B. Marston et I. Affleck. *Phys. Rev. B* **39**(16), 11538–11558 (1989).
- [155] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke et M. H. Hettler. *Reviews of Modern Physics* **77**(3), 1027–1080 (2005).
- [156] Y. Qi et S. Sachdev. *Phys. Rev. B* **81**(11), 115129 (2010).
- [157] J. Chang, E. Blackburn, A. T. Holmes, N. B. Christensen, J. Larsen, J. Mesot, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, A. Watenphul, M. v Zimmermann, E. M. Forgan et S. M. Hayden. *Nat. Phys.* **8**(12), 871–876 (2012).
- [158] L. Nordheim. *Ann. Phys.* **9**, 607–641 (1931).
- [159] L. Bellaïche et D. Vanderbilt. *Phys. Rev. B* **61**(12), 7877–7882 (2000).
- [160] W. A. Atkinson, A. P. Kampf et S. Bulut. *New J. Phys.* **17**(1), 013025 (2015).
- [161] R. Côté et A. M. S. Tremblay. *EPL (Europhysics Letters)* **29**(1), 37 (1995).
- [162] S. Chatterjee, S. Sachdev et A. Eberlein. *Phys. Rev. B* **96**(7), 075103 (2017).
- [163] K. Yamada, C. H. Lee, K. Kurahashi, J. Wada, S. Wakimoto, S. Ueki, H. Kimura, Y. Endoh, S. Hosoya, G. Shirane, R. J. Birgeneau, M. Greven, M. A. Kastner et Y. J. Kim. *Phys. Rev. B* **57**(10), 6165–6172 (1998).
- [164] J. P. F. LeBlanc. *New J. Phys.* **16**(11), 113034 (2014).
- [165] M. R. Norman, A. Kanigel, M. Randeria, U. Chatterjee et J. C. Campuzano. *Phys. Rev. B* **76**(17), 174501 (2007).
- [166] M. F. Smith et R. H. McKenzie. *Phys. Rev. B* **82**(1), 012501 (2010).
- [167] P. Voruganti, A. Golubentsev et S. John. *Phys. Rev. B* **45**(24), 13945–13961 (1992).
- [168] I. Paul et G. Kotliar. *Phys. Rev. B* **67**(11), 115131 (2003).
- [169] G. H. Wannier. *Reviews of Modern Physics* **34**(4), 645–655 (1962).
- [170] G. Nenciu. *Reviews of Modern Physics* **63**(1), 91–127 (1991).
- [171] M.-C. Chang et Q. Niu. *Journal of Physics: Condensed Matter* **20**(19), 193202 (2008).
- [172] L. Onsager. *Philosophical Magazine Series 7* **43**(344), 1006–1008 (1952).
- [173] W. Shockley. *Phys. Rev.* **79**(1), 191–192 (1950).
- [174] M.-C. Chang et Q. Niu. *Phys. Rev. B* **53**(11), 7010–7023 (1996).
- [175] D. Xiao, M.-C. Chang et Q. Niu. *Reviews of Modern Physics* **82**(3), 1959–2007 (2010).
- [176] T. Kondo, T. Takeuchi, U. Mizutani, T. Yokoya, S. Tsuda et S. Shin. *Phys. Rev. B* **72**(2), 024533 (2005).
- [177] J. G. Storey, J. L. Tallon et G. V. M. Williams. *EPL (Europhysics Letters)* **102**(3), 37006 (2013).
- [178] M. Abdel-Jawad, M. P. Kennett, L. Balicas, A. Carrington, A. P. Mackenzie, R. H. McKenzie et N. E. Hussey. *Nat. Phys.* **2**(12), 821–825 (2006).
- [179] M. Abdel-Jawad, J. G. Analytis, L. Balicas, A. Carrington, J. P. H. Charmant, M. M. J. French et N. E. Hussey. *Phys. Rev. Lett.* **99**(10), 107002 (2007).
- [180] J. Kokalj, N. E. Hussey et R. H. McKenzie. *Phys. Rev. B* **86**(4), 045132 (2012).
- [181] N. E. Hussey. *Journal of Physics: Condensed Matter* **20**(12), 123201 (2008).
- [182] A. Moutenet et A. Georges. (*communication privée*).
- [183] J. G. Storey, J. L. Tallon et G. V. M. Williams. *Phys. Rev. B* **77**(5), 052504 (2008).
- [184] J. P. F. LeBlanc, E. J. Nicol et J. P. Carbotte. *Phys. Rev. B* **80**(6), 060505 (2009).
- [185] G. C. McIntosh et A. B. Kaiser. *Phys. Rev. B* **54**(17), 12569 (1996).
- [186] M. Fujita, K. Yamada, H. Hiraka, P. M. Gehring, S. H. Lee, S. Wakimoto et G. Shirane. *Phys. Rev. B* **65**(6), 064505 (2002).

- [187] D. Haug, V. Hinkov, Y. Sidis, P. Bourges, N. B. Christensen, A. Ivanov, T. Keller, C. T. Lin et B. Keimer. *New J. Phys.* **12**(10), 105006 (2010).
- [188] F. F. Balakirev, J. B. Betts, A. Migliori, I. Tsukada, Y. Ando et G. S. Boebinger. *Phys. Rev. Lett.* **102**(1), 017004 (2009).
- [189] I. Tsukada et S. Ono. *Phys. Rev. B* **74**(13), 134508 (2006).
- [190] A. Narduzzo, G. Albert, M. M. J. French, N. Mangkorntong, M. Nohara, H. Takagi et N. E. Hussey. *Phys. Rev. B* **77**(22), 220502 (2008).
- [191] K. Segawa et Y. Ando. *Journal of Low Temperature Physics* **131**(5-6), 821–830 (2003).
- [192] N. Das et N. Singh. *Physics Letters A* **380**(3), 490–494 (2016).
- [193] P. Angeletti. *Electronics letters* **48**(3), 1 (2012).
- [194] D. Sénéchal. *arXiv:0806.2690 [cond-mat]* (2008).
- [195] R. P. Feynman. *Phys. Rev.* **56**(4), 340–343 (1939).
- [196] B. M. Deb. *Chemical Physics Letters* **17**(1), 78–79 (1972).
- [197] M. V. Berry. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **392**(1802), 45–57 (1984).